

# Thermoelektrische Transportuntersuchungen an topologischen und korrelierten Elektronensystemen

Dissertation  
zur Erlangung des akademischen Grades  
Doktor rerum naturalium

vorgelegt von

Christoph Wuttke  
geboren am 03.06.1992 in Elsterwerda

Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung Dresden  
Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften  
der Technischen Universität Dresden  
Fachrichtung Physik

2020

Eingereicht am 11.08.2020

Verteidigt am 07.12.2020

1. Gutachter: Prof. Dr. Bernd Büchner
2. Gutachter: Prof. Dr. Rüdiger Klingeler

# Kurzdarstellung

In dieser Arbeit werden Messungen elektrischer, thermischer und insbesondere thermoelektrischer Transportkoeffizienten in topologischen Weyl-Halbmetall-Kandidaten sowie in eisenbasierten Hochtemperatur-Supraleitern vorgestellt, analysiert und diskutiert.

In TaAs und TaP, zwei Weyl-Halbmetall-Kandidaten mit gebrochener Inversionssymmetrie, liefert das anomale Verhalten des Nernst-Signals in Abhängigkeit des Magnetfeldes Hinweise auf die Existenz von Weyl-Punkten in der Nähe der Fermi-Fläche, wobei sich die Verschiebung des chemischen Potenzials sowie ein Lifshitz-Übergang detektieren lassen. Die Temperaturabhängigkeit des Nernst-Signales erlaubt außerdem Rückschlüsse auf den Abstand der Weyl-Punkte zur Fermi-Fläche.

In  $\text{Mn}_3\text{Ge}$ , einem Weyl-Halbmetall-Kandidaten mit gebrochener Zeitumkehrsymmetrie, zeigt sich für alle gemessenen Temperaturen ein komplett anomales Verhalten des Nernst-Signals in Abhängigkeit des Magnetfeldes mit einer rechteckigen Hysterese bei kleinen Feldern, welches im Vergleich mit Daten der Magnetisierung einen eindeutigen Hinweis auf die Präsenz von Weyl-Punkten in diesem Material liefert. Mithilfe eines minimalen theoretischen Modells zweier Weyl-Punkte in der Nähe der Fermi-Fläche lässt sich eine Anpassungsformel für die Temperaturabhängigkeit des Nernst-Signals gewinnen, aus welcher sowohl geometrische Parameter der Bandstruktur als auch die Stärke der Berry-Krümmung an der Fermi-Energie extrahiert werden können.

Für eisenbasierte Supraleiter besteht seit Langem der Verdacht, dass nematische Fluktuationen einen Einfluss auf die Supraleitung haben. Hier vorgestellte theoretische Betrachtungen zeigen im Rahmen eines Zweibandmodells eindeutig, dass eine endliche nematische Kopplung zu einer starken Erhöhung und einer nicht-monotonen Abhängigkeit des Nernst-Koeffizienten von der Dotierung führt, welcher ein Maximum über dem supraleitenden Dom aufweist. Dies wird anhand von Nernst-Messungen in Co-dotiertem  $\text{LaFeAsO}$  bestätigt. Ein Vergleich der Ergebnisse des Nernst-Effekts mit Elasto-Widerstandsmessungen enthüllt eine erstaunliche Ähnlichkeit der Dotierabhängigkeiten. Die Daten werden außerdem mit Messungen des Nernst-Effekts an Rh-dotiertem  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  verglichen, wobei ebenfalls eine Erhöhung im Bereich optimaler Dotierung nachgewiesen werden kann. In  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  zeigt sich jedoch ein Unterschied zwischen Elasto-Widerstands- und Nernst-Messungen, woraus abgeleitet wird, dass Elasto-Widerstandsmessungen kein vollständiges Bild der nematischen Fluktuation liefern. Der Nernst-Effekt ist hingegen aufgrund der Sensitivität auf nematische Fluktuationen universell in zwei Vertretern verschiedener Familien eisenbasierter Supraleiter maximal im Bereich des supraleitenden Doms. Dies liefert, zusammen mit den theoretischen Betrachtungen, einen starken Hinweis auf den Einfluss nematischer Fluktuationen auf die Supraleitung.

# Abstract

In this work the electric, thermal, and thermoelectric transport properties of several topological Weyl semimetal candidates and iron-based superconductors are investigated.

In TaAs and TaP, two Weyl semimetal candidates with broken inversion symmetry, the Nernst signal exhibits anomalous behaviour as a function of magnetic field, consistent with Weyl points close to the Fermi surface. Furthermore, a shift of the chemical potential and a Lifshitz transition are detected. The temperature dependence of the Nernst signal allows for an estimation of the energy of the Weyl points with respect to the Fermi level.

In  $\text{Mn}_3\text{Ge}$ , a Weyl semimetal candidate with broken time reversal symmetry, the Nernst signal shows completely anomalous behaviour as a function of magnetic field that can be obtained at all measured temperatures. At low fields the signal exhibits a rectangular hysteresis cycle. A comparison with magnetization measurements evidently shows that these effects are caused by Weyl points lying close to the Fermi surface. With the help of a minimal model of two Weyl points in the vicinity of the Fermi level, a fitting formula of the temperature dependence of the Nernst signal can be obtained. The fit provides geometrical properties of the band structure, such as the  $\mathbf{k}$ -space separation of the Weyl points, their energy with respect to the Fermi level as well as the strength of the Berry curvature close to the Fermi energy.

For a long time nematic fluctuations have been suspected to influence superconductivity in iron-based superconductors. A theoretical analysis, with the help of a two-band model, shows clearly that a finite nematic coupling causes a strong enhancement and non-monotonic behaviour of the Nernst coefficient, which develops a maximum above the superconducting dome. These findings are confirmed by Nernst measurements in Co-doped  $\text{LaFeAsO}$ . A comparison with elasto-resistivity measurements shows a stunning similarity of the doping dependencies of both quantities. Furthermore the data are compared with measurements on Rh-doped  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ , which also exhibits an enhancement of the Nernst coefficient in the region of optimal doping. However, in Rh-doped  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  a difference between elasto-resistivity and Nernst measurements is obtained, indicating that the elasto-resistivity measurements are not universally sensitive to nematic fluctuations. The Nernst effect, on the other hand, is enhanced in the vicinity of the superconducting dome in two members of different families of iron-based superconductors. Together with theoretical insights, these results provide strong evidence for the influence of nematic fluctuations on superconductivity in the iron-based superconductors.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Physikalische Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1	Transport . . . . .	5
2.1.1	Boltzmann-Transport . . . . .	7
2.1.2	Elektrische Leitfähigkeit . . . . .	12
2.1.3	Wärmeleitfähigkeit . . . . .	20
2.1.4	Thermoelektrische Leitfähigkeit . . . . .	26
2.2	Anomaler transversaler Transport . . . . .	34
2.2.1	Berry-Phase und Berry-Krümmung . . . . .	34
2.2.2	Symmetrieüberlegungen . . . . .	37
2.2.3	Anomaler Hall-Effekt . . . . .	37
2.2.4	Anomaler thermoelektrischer Transport . . . . .	38
<b>3</b>	<b>Messaufbau und -methoden</b>	<b>40</b>
3.1	Messsystem . . . . .	40
3.2	Messmethoden . . . . .	41
3.2.1	Widerstand und Hall-Effekt . . . . .	41
3.2.2	Wärmeleitfähigkeit . . . . .	44
3.2.3	Seebeck-Effekt . . . . .	46
3.2.4	Nernst-Effekt . . . . .	48
3.3	Messunsicherheiten . . . . .	49
<b>4</b>	<b>Topologische Materialien</b>	<b>51</b>
4.1	Weyl-Halbmatalle . . . . .	51
4.2	TaAs und TaP: Weyl-Halbmatal-Kandidaten mit gebrochener Inversionssymmetrie . . . . .	56
4.2.1	Anomaler Nernst-Effekt in TaAs und TaP . . . . .	56
4.2.2	Auswertung . . . . .	59
4.3	Mn <sub>3</sub> Ge: Weyl-Halbmatal-Kandidat mit gebrochener Zeitumkehrsymmetrie . .	64
4.3.1	Transportmessungen an Mn <sub>3</sub> Ge . . . . .	67

4.3.2	Nernst-Effekt in $\text{Mn}_3\text{Ge}$ . . . . .	71
4.3.3	Auswertung . . . . .	78
4.4	Diskussion . . . . .	85
<b>5</b>	<b>Eisenbasierte Supraleiter</b>	<b>88</b>
5.1	Einleitung . . . . .	88
5.2	Nematische Ordnung . . . . .	94
5.2.1	Elasto-Widerstand . . . . .	97
5.3	Co-dotiertes $\text{LaFeAsO}$ . . . . .	100
5.3.1	Spezifischer Widerstand und Hall-Effekt in $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ . . . . .	100
5.3.2	Seebeck-Effekt in $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ . . . . .	105
5.3.3	Nernst-Effekt in $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ . . . . .	109
5.3.4	Wärmeleitung in $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ . . . . .	128
5.4	Diskussion . . . . .	134
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>136</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>140</b>
A.1	Nernst-Signal in $\text{Mn}_3\text{Ge}$ . . . . .	140
A.2	Nernst-Signal in $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ . . . . .	141
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>142</b>

# 1 Einleitung

*“Alles ist Wechselwirkung.”*

– Alexander von Humboldt, *Reisetagebuch*, 1803

Dieser Gedanke Alexander von Humboldts, welchen er 1803 im Tal von Mexiko in sein Reisetagebuch schrieb, legte in vielerlei Hinsicht einen der Grundsteine der modernen Naturwissenschaften. Während seiner Expedition bemerkte der Naturforscher fortwährend, dass selbst kleine Änderungen der Umgebungsbedingungen, vor allem in Form menschlicher Eingriffe, einen verheerenden Einfluss auf die Ökosysteme haben. Diese revolutionäre Erkenntnis Humboldts entstammte dabei zwar hauptsächlich den Erlebnissen seiner Reise, er wurde jedoch auch von den Eindrücken früherer Abenteurer und Entdecker motiviert und konnte an deren Berichte anknüpfen. Damals war das Reisen die wohl wertvollste Quelle wissenschaftlicher Erkenntnis. Ungeachtet dessen waren solche Expeditionen lebensgefährlich, und die Beschaffung von Literatur, Ausrüstung und insbesondere Messapparaturen zudem beschwerlich und teuer. Stets mussten einflussreiche Geldgeber gefunden werden, welche hauptsächlich imperialistische Interessen verfolgten. Humboldts Südamerikareise gingen deshalb jahrelange Studien, monatelange Tests der Messapparaturen und Vergleichsmessungen in verschiedenen europäischen Regionen sowie zahlreiche Rückschläge während der Suche eines Finanziers voraus.

Seit dieser Zeit beschleunigt sich die Zunahme des menschlichen Wissens unaufhörlich. Dessen Erwerb ist heute hingegen ungleich einfacher als damals. So stellte zwar Humboldt den Mittelpunkt einer globalen Vernetzung dar und vermittelte stets zwischen den unterschiedlichen wissenschaftlichen Disziplinen, er schrieb dafür jedoch Zeit seines Lebens beinahe 50.000 Briefe an befreundete Wissenschaftler und einflussreiche Persönlichkeiten. Gegenwärtig erlaubt uns die Globalisierung, insbesondere das Internet und die weite Verbreitung mobiler Technologien, eine nie dagewesene Form der Kommunikation wissenschaftlicher Erkenntnisse beinahe in Echtzeit.

In enger Wechselwirkung geht die Zunahme des Wissens seither mit der Entfaltung des Wohlstands und des technologischen Fortschritts einher, jedoch leider auch mit der fortschreitenden Zerstörung der Grundlagen dieser Evolution. Bereits Humboldt kritisierte das verschwenderische Eingreifen des Menschen in die Natur ohne Rücksicht auf die eigene Abhängigkeit von dieser. Nicht zuletzt sollte sein oben niedergeschriebener Gedanke schließlich auch auf diese

Problematik hinweisen [1]. Um diesem Prozess Einhalt zu gebieten, sind wir deshalb mehr denn je auf die Entwicklung schneller, effizienter, ressourcenschonender und energiesparender Technologien angewiesen.

Seit langem ist die physikalische Grundlagenforschung kondensierter Materie, insbesondere an neuen Materialien, ein Antrieb technologischer Entwicklungen. So wie die Nutzung halbleitender Materialien das Informationszeitalter einleitete, könnte dieses durch die Anwendung exotischer Zustände der Materie revolutioniert werden. Ein grundlegendes Verständnis der Hochtemperatur-Supraleitung bringt Hoffnung auf die Entdeckung der Supraleitung bei Raumtemperatur mit sich. Diese würde energiearme Verkehrsmittel und die verlustfreie Leitung von elektrischem Strom ermöglichen. Weitere technologische Fortschritte verspricht die Erforschung topologischer Eigenschaften von Festkörpern, da ein fundiertes Wissen über selbige für die gezielte Entwicklung von Materialien mit gewünschtem Einfluss der Berry-Krümmung genutzt werden könnte. Damit ließen sich effektivere Schaltungen mittels topologischer Elektronik sowie wirkungsvollere thermoelektrische Bauelemente herstellen [2].

Das Auftreten von Phänomenen wie der Hochtemperatur-Supraleitung oder der Berry-Krümmung wird als Emergenz bezeichnet. Sie stellen Eigenschaften dar, die aufgrund der Wechselwirkung in einem Vielteilchensystem entstehen, nicht jedoch in einem einzelnen Teilchen vorkommen können. Um diese Prozesse zu verstehen, stellt sich somit stets die Frage nach der physikalischen Ursache der beteiligten Wechselwirkungen. In undotierten Vertretern der Kuprat-Supraleiter existiert oft keine Supraleitung, sondern ein Mott-isolierender antiferromagnetischer Grundzustand. Gleiches gilt für eisenbasierte Supraleiter, welche häufig eine antiferromagnetische Spin-Dichte-Welle aufweisen. In einem Phasendiagramm, das von Temperatur und chemischer Dotierung (oder Druck) aufgespannt wird, zeigt sich jedoch in direkter Nachbarschaft der antiferromagnetischen Phase ein, bei endlicher Dotierung entstehender, supraleitender Dom. Zusätzlich existieren meist in der Nähe des Übergangsbereichs beider Phasen weitere elektronische Ordnungen. In Kuprat-Supraleitern treten in diesem Bereich Ladungs- und Spin-Dichte-Wellen sowie Symmetriebrechungen innerhalb der Einheitszelle auf, in eisenbasierten Supraleitern entsteht eine nematische Ordnung [3]. Die Beziehung dieser unterschiedlichen Phasen zueinander konnte jedoch noch nicht grundlegend geklärt werden. Vornehmlich die Frage, welche effektive Wechselwirkung zum Auftreten der Supraleitung führt, ob diese durch die anderen Ordnungen beeinflusst wird, und unter welchen Voraussetzungen sie in einem Material vorhanden ist, wurde noch nicht widerspruchsfrei beantwortet.

Auch topologisch nicht-triviale Zustände können aufgrund der elektronischen Wechselwirkung entstehen. Besteht in einem Isolator eine starke Spin-Bahn-Wechselwirkung, kann es zur Inversion von Valenz- und Leitungsband kommen. Dirac-Halbmetalle stellen einen Sonderfall solcher Materialien dar, da sich in ihnen die Bänder in Dirac-Punkten berühren, wodurch eine lineare Banddispersion entsteht. Kommt es zusätzlich zu einer Brechung der Inversions- oder Zeitumkehrsymmetrie, spalten sich Dirac-Punkte in jeweils zwei Weyl-Punkte auf, wel-

che Quellen und Senken der Berry-Krümmung repräsentieren [4]. Es bedarf somit eines klaren Verständnisses und geeigneter Nachweismethoden letzterer, um diese exotischen Zustände der Materie technologisch nutzen zu können.

Die vorliegende Arbeit soll einen Beitrag zur Erforschung von Vertretern sowohl topologischer Materialien als auch eisenbasierter Supraleiter sowie deren emergenter Eigenschaften leisten. Dazu werden elektrische, thermische und insbesondere thermoelektrische Transportmessungen genutzt. Der Schwerpunkt liegt dabei auf Messungen des Nernst-Effekts. Dieser beschreibt einen der magneto-thermoelektrischen Effekte, welche 1886 von Walther Nernst und Albert von Ettinghausen entdeckt wurden [5, 6] und stellt das transversale Analogon des Seebeck-Effekts dar. Die entsprechenden Nernst-Spannungen sind im allgemeinen sehr klein und deshalb schwierig zu messen. Aufgrund immer weiter verbesserter Messtechnik konnte sich der Nernst-Effekt jedoch in den letzten Jahren in der Festkörperforschung als sensitive Sonde etablieren, um subtile Eigenschaften von wechselwirkenden Elektronensystemen zu erfassen.

Es werden im Folgenden Messungen an verschiedenen Vertretern der topologischen Materialien, den Weyl-Halbmetall-Kandidaten TaAs/TaP und  $\text{Mn}_3\text{Ge}$ , vorgestellt. Die Materialien TaAs und TaP besitzen eine gebrochene Inversionssymmetrie, während  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  eine gebrochene Zeitumkehrsymmetrie aufweist. Mithilfe des Nernst-Effekts wird ein experimenteller Zugriff auf die Berry-Krümmung sowie auf die geometrischen Eigenschaften der Bandstruktur in der Nähe der Weyl-Punkte etabliert.

Außerdem werden Transportmessungen an  $\text{LaFeAsO}$ , welches mit verschiedenen Anteilen von Co auf der Fe-Position dotiert wird, vorgestellt. Der Fokus liegt dabei auf Messungen der Wärmeleitfähigkeit und des Nernst-Effektes. Letzterer dient hierbei als Nachweis nematischer Fluktuationen, wird durch ein minimales theoretisches Modell eisenbasierter Supraleiter mit nematischer Kopplung unterstützt und mit etablierten Elasto-Widerstandsmessungen sowie mit den Messungen der Wärmeleitfähigkeit verglichen. Zusätzlich erfolgt der Vergleich mit früheren Messungen an Rh-dotiertem  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ , womit neue Erkenntnisse über den universellen Einfluss nematischer Fluktuationen in eisenbasierten Supraleitern gewonnen werden.

Die Ausführungen werden in 5 weitere Abschnitte gegliedert. Zunächst erfolgt in Kapitel 2 eine Einführung in den physikalischen Ursprung der elektrischen, thermischen und thermoelektrischen Transportkoeffizienten. In Kapitel 3 werden die experimentellen Messaufbauten und -methoden vorgestellt, welche für Transportmessungen bei hohen Magnetfeldern und sehr tiefen Temperaturen benötigt werden. Anschließend erfolgt in Kapitel 4 zunächst ein Überblick über die Eigenschaften topologischer Materialien mit Fokus auf Weyl-Halbmetallen. Des Weiteren werden Nernst-Effekt-Daten und deren Auswertung an TaAs und TaP sowie Daten, theoretische Betrachtungen und deren Auswertung an  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  vorgestellt und diskutiert. Kapitel 5 widmet sich zuerst einer Einführung der eisenbasierten Supraleiter mit speziellem Fokus auf der nematischen Ordnung. Nach einer Vorstellung und Auswertung des elektrischen

Transports und des Seebeck-Effekts erfolgt eine Analyse des Nernst-Effekts mit theoretischer Unterstützung, ein Vergleich mit Elasto-Widerstandsmessungen sowie mit der Wärmeleitfähigkeit. Die Transportgrößen werden mit Messungen an Rh-dotiertem  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  verglichen und anschließend diskutiert. Alle Ergebnisse dieser Arbeit werden abschließend in Kapitel 6 zusammengefasst.

## 2 Physikalische Grundlagen

### 2.1 Transport

Transportphänomene im Festkörper sind stets auf die Existenz einer Potenzialdifferenz zurückzuführen. Der daraus entstehende Gradient führt zum Transport der an das Potenzial koppelnden Ladungsträger, welcher sich als Strom auswirkt. Im stationären Zustand ( $\partial/\partial t = 0$ ) und unter der Annahme, dass die Potenzialdifferenz klein ist, sollte der Zusammenhang zwischen Potenzialdifferenz und Strom linear sein. Somit gilt für das Anlegen eines elektrischen Feldes, welches einem elektrischen Potenzialgradienten entspricht, folgender Zusammenhang:

$$\mathbf{j}_e = \bar{\sigma} \cdot \mathbf{E} . \quad (2.1)$$

Der Strom der elektrischen Ladungsträger  $\mathbf{j}_e$  hängt linear vom angelegten elektrischen Feld  $\mathbf{E}$  ab. Analog wird ein Wärmestrom  $\mathbf{j}_Q$  durch einen Temperaturgradienten  $\nabla T$  verursacht:

$$\mathbf{j}_Q = -\bar{\kappa} \cdot \nabla T . \quad (2.2)$$

Die beiden Proportionalitätskonstanten sind die entsprechenden Transportkoeffizienten, die elektrische Leitfähigkeit  $\bar{\sigma}$  und die thermische bzw. Wärmeleitfähigkeit  $\bar{\kappa}$ . Im Allgemeinen sind die Transportkoeffizienten Tensoren, da die Ströme und entsprechenden Felder nicht notwendigerweise parallel sein müssen. In zwei Dimensionen (mit  $x$ - und  $y$ -Richtung) gilt somit:

$$\bar{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} . \quad (2.3)$$

Die Gleichungen 2.1 und 2.2 gelten außerdem nur, wenn die jeweils anderen Ströme bzw. Felder verschwinden, also für Gleichung 2.1  $\mathbf{j}_Q = 0$  und  $\nabla T = 0$  sowie für Gleichung 2.2  $\mathbf{j}_e = 0$  und  $\mathbf{E} = 0$  gilt. Ist diese Bedingung nicht erfüllt, können im Allgemeinen auch Temperaturgradienten einen elektrischen Strom und elektrische Felder einen Wärmestrom hervorrufen. In diesem allgemeinen Fall lassen sich deshalb die Transportgleichungen in folgender kompakter

Schreibweise darstellen:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{j}_e \\ \mathbf{j}_Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\sigma} & \bar{\alpha} \\ T\bar{\alpha} & \bar{\kappa} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ -\nabla T \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Diese Gleichung beschreibt das Auftreten aller Transportphänomene. Die elektrische Leitfähigkeit  $\bar{\sigma}$  und die thermische Leitfähigkeit  $\bar{\kappa}$  stellen die Diagonalelemente der Matrix dar. Setzt man  $\mathbf{j}_Q = 0$  und  $\nabla T = 0$ , so ergibt sich der Zusammenhang zwischen elektrischer Feldstärke und elektrischem Strom in Gleichung 2.1. Analog erhält man Gleichung 2.2 als Zusammenhang zwischen Temperaturgradient und Wärmestrom unter der Voraussetzung  $\mathbf{j}_e = 0$  und  $\mathbf{E} = 0$ . Die Nebendiagonalelemente werden durch den Peltier-Tensor (auch thermoelektrische Leitfähigkeit genannt)  $\bar{\alpha}$  gebildet. Die vollständige Beschreibung der elektrischen Stromdichte lautet also:

$$\mathbf{j}_e = \bar{\sigma} \cdot \mathbf{E} - \bar{\alpha} \cdot \nabla T. \quad (2.5)$$

Befindet sich der Festkörper mit einem Temperaturgradienten in einer elektrisch isolierenden Umgebung ( $\mathbf{j}_e = 0$ ), so vereinfacht sich der Ausdruck zu

$$0 = \bar{\sigma} \cdot \mathbf{E} - \bar{\alpha} \cdot \nabla T, \quad (2.6)$$

und lässt sich nach dem elektrischen Feld umformen:

$$\mathbf{E} = \bar{\sigma}^{-1} \bar{\alpha} \cdot \nabla T = \bar{S} \cdot \nabla T. \quad (2.7)$$

In diesem Fall wird der Zusammenhang zwischen elektrischem Feld und dem Temperaturgradienten vom Seebeck-Koeffizienten  $\bar{S}$  bestimmt, welcher sich aus dem Tensor der elektrischen Leitfähigkeit und dem Peltier-Tensor zusammensetzt:

$$\bar{S} = \bar{\sigma}^{-1} \bar{\alpha}. \quad (2.8)$$

Durch die Messung der angelegten Potenzialdifferenz und des daraus resultierenden Stroms können somit die verschiedenen Transportkoeffizienten eines Festkörpers bestimmt und ihre Abhängigkeit von externen Parametern wie z.B. der Temperatur ermittelt werden. Um jedoch aus solchen Messungen Informationen über mikroskopische Zusammenhänge zu gewinnen, muss der Zusammenhang der Transportkoeffizienten mit grundlegenden Eigenschaften des Gitters, des magnetischen Systems und des elektronischen Systems eines Festkörpers hergeleitet werden. Ein möglicher Ansatz, welcher oft für theoretische Betrachtungen verwendet wird, geht von der Verteilung der elektronischen Zustände aus [7, 8] und soll im folgenden Abschnitt vorgestellt werden. Die in diesem Kapitel vorgestellten Herleitungen und Interpretationen der Transportkoeffizienten folgen im Wesentlichen, jedoch nicht ausschließlich, den Referenzen [7] (elektrischer Transport, thermischer Transport), [9] und [10] (thermischer Transport), [8] (Boltzmann-Theorie und thermoelektrischer Transport) und [11] (Nernst-Effekt).



### 2.1.1 Boltzmann-Transport

Der Fokus dieser theoretischen Einführung soll auf den Ladungsträgern im Festkörper liegen. Der Boltzmann-Formalismus lässt sich jedoch auch leicht auf andere Quasiteilchen, wie z.B. Phononen oder Magnonen, mittels der Berücksichtigung der entsprechend wirkenden Potentiale übertragen.

Die Verteilungsfunktion  $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, einen Ladungsträger mit Wellenvektor  $\mathbf{k}$  am Ort  $\mathbf{r}$  zu finden. Im Falle eines ungestörten Systems entspricht diese Verteilung bezogen auf die Energie genau der Fermi-Verteilung  $f^0$ :

$$f^0(\epsilon) = \frac{1}{e^{[(\epsilon-\mu)/k_B T]} + 1} . \quad (2.9)$$

Dabei ist  $\epsilon$  die Energie des Ladungsträgers und  $\mu$  das chemische Potenzial. Ein elektrisches Feld oder ein Temperaturgradient beeinflussen die Verteilung  $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , indem sie die Wahrscheinlichkeiten für Aufenthaltsorte der Ladungsträger verändern. Jeder Ladungsträger besitzt eine Gruppengeschwindigkeit, welche sich aus der Bandstruktur an einem Punkt  $\mathbf{k}$  ableiten lässt:

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} . \quad (2.10)$$

Der elektrische Strom ergibt sich aus der Netto-Bewegung von Ladungsträgern durch den Festkörper:

$$\mathbf{j}_e = \int \mathbf{v}_{\mathbf{k}} e f_{\mathbf{k}} d^3 k . \quad (2.11)$$

Da jeder Ladungsträger eine thermische Energie von  $(\epsilon - \mu)$  transportiert, lässt sich der Wärmestrom analog ausdrücken als:

$$\mathbf{j}_Q = \int \mathbf{v}_{\mathbf{k}} (\epsilon - \mu) f_{\mathbf{k}} d^3 k . \quad (2.12)$$

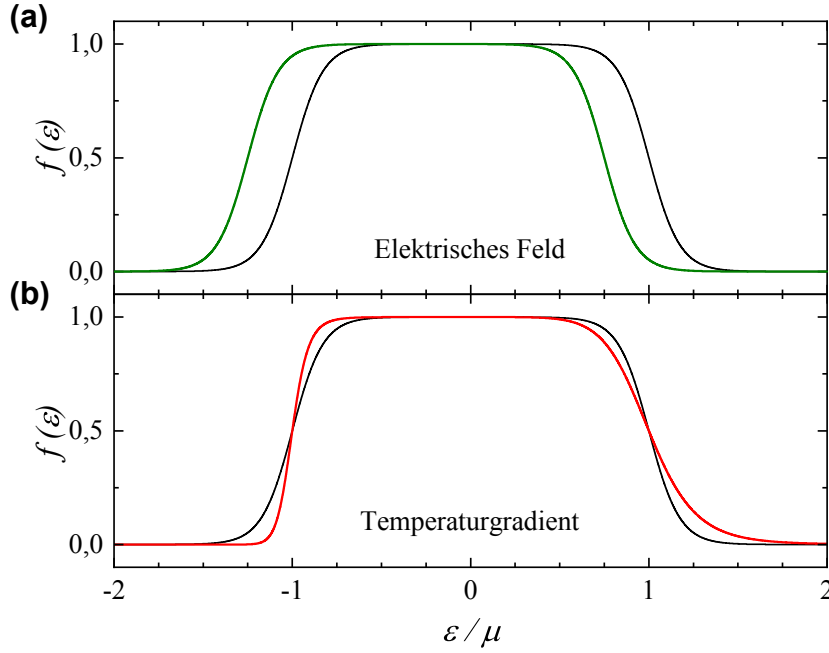
Ein endliches elektrisches Feld oder ein Temperaturgradient würden nun eine räumliche Variation von  $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  hervorrufen. Zusätzlich sorgt die Streuung unter den Ladungsträgern für eine Veränderung der Zustände. Um Streuprozesse zu erfassen, wird oft die sogenannte Relaxationszeitnäherung benutzt [8]:

$$\frac{df_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{dt} = \frac{f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - f^0}{\tau} . \quad (2.13)$$

Hierbei ist  $\tau$  die mittlere Streuzeit, also die Zeit zwischen zwei Streueignissen. Die Veränderung der Zustandsverteilung aufgrund eines externen Temperaturgradienten kann durch

$$\frac{df_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{dt} = \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \approx \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial f^0}{\partial T} \cdot \nabla T \quad (2.14)$$

genähert werden. Es wird somit angenommen, dass sich der Effekt eines Temperaturgradienten



**Abbildung 2.1:** Schematische Darstellung der Veränderung der Fermi-Verteilung (schwarze Linie) unter dem Einfluss eines externen **(a)** elektrischen Feldes und eines **(b)** Temperaturgradienten. In Gegenwart eines elektrischen Feldes wird die Verteilung verschoben (grüne Linie), während in einem Temperaturgradienten beide Seiten der Verteilung unterschiedlich stark abfallen (rote Linie). Die Abbildung ist eine Adaption der entsprechenden Grafik aus Ref. [8].

lediglich in der temperaturabhängigen Verbreiterung der Fermi-Verteilung auswirkt. Analog dazu wird die Zustandsverteilung durch ein externes elektrisches Feld folgendermaßen verändert:

$$\frac{df_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{dt} = \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{k}} \approx e \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \cdot \mathbf{E} . \quad (2.15)$$

Unter der Annahme, dass sich diese drei Effekte im Gleichgewichtszustand gegenseitig aufheben, folgt die sogenannte linearisierte Boltzmann-Gleichung:

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial f^0}{\partial T} \cdot \nabla T + e \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \cdot \mathbf{E} + \frac{f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - f^0}{\tau} = 0 . \quad (2.16)$$

Die lokale Verteilung der Zustände der Ladungsträger ergibt sich somit aus der Fermi-Verteilung unter dem Einfluss von zwei Störungen:

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = f^0 - \tau \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \left( \frac{\partial f^0}{\partial T} \cdot \nabla T + e \cdot \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \cdot \mathbf{E} \right) . \quad (2.17)$$

Hier ist deutlich erkennbar, dass die Einflüsse eines elektrischen Feldes und eines Temperaturgradienten auf die Verteilungsfunktion sehr unterschiedlich sind. Während der elektrische Term von einer Energieableitung der Verteilung abhängt, wird der Temperaturterm durch eine Temperaturableitung bestimmt. Dieser Unterschied führt zu fundamental verschiedenen Phä-

nomenen, wie in Abbildung 2.1 deutlich wird. Der Einfluss eines elektrischen Feldes bewirkt eine energetische Verschiebung der Fermi-Verteilung (vgl. Abbildung 2.1a), da Elektronen, die sich entgegen des Feldes bewegen, Energie verlieren, während solche, die sich entlang des Feldes bewegen, einen Energiezuwachs erfahren. Liegt jedoch ein Temperaturgradient an, so wird der Abfall der Verteilung für die Elektronen, die sich in Richtung der kalten Seite der Probe bewegen, flacher und für solche, die sich in Richtung der warmen Seite bewegen, steiler (vgl. Abbildung 2.1b).

Aus Gleichung 2.17 folgt für den elektrischen Strom im Fall von  $\nabla T = 0$ :

$$\mathbf{j}_e = \int \left( \mathbf{v}_k e f^0 - e^2 \tau \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{v}_k \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_k} \cdot \mathbf{E} \right) d^3k . \quad (2.18)$$

Da im Gleichgewichtszustand die mittlere Geschwindigkeit der Ladungsträger Null ist, verschwindet der erste Term des Integrals. Mithilfe von Gleichung 2.1 erhält man nun einen Ausdruck für die elektrische Leitfähigkeit:

$$\bar{\sigma} = -e^2 \int \tau(\mathbf{k}) \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{v}_k \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_k} d^3k . \quad (2.19)$$

Analog folgt für den Fall  $\mathbf{E} = 0$  für den elektrischen Strom:

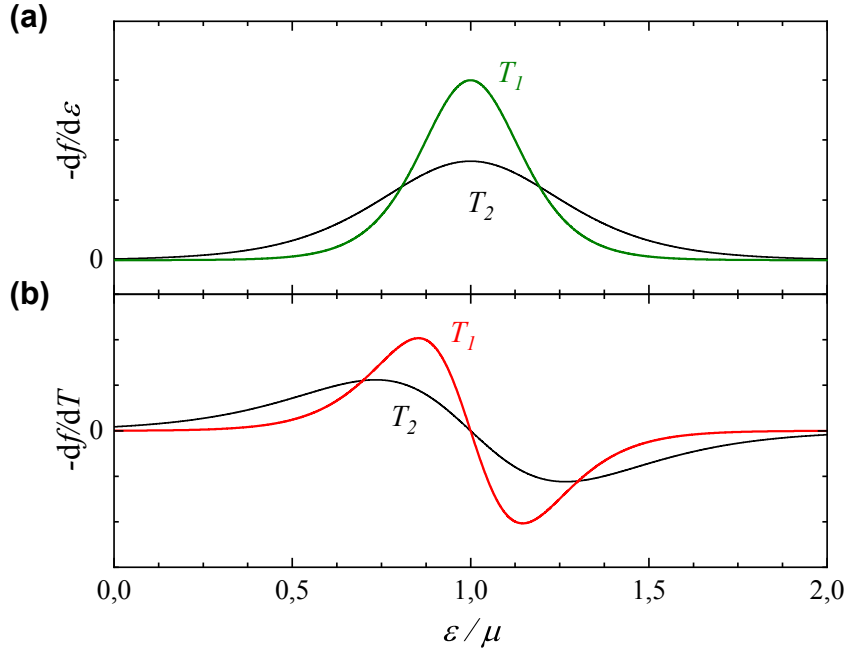
$$\mathbf{j}_e = - \int e \tau \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{v}_k \frac{\partial f^0}{\partial T} \cdot \nabla T d^3k . \quad (2.20)$$

Man beachte dabei, dass dieser Fall nicht auf eine Darstellung des Seebeck-Koeffizienten schließen lässt, da dieser für den Fall  $\mathbf{j}_e = 0$  definiert ist. Aus Gleichung 2.20 folgt im Vergleich mit Gleichung 2.4 dagegen ein Ausdruck für die thermoelektrische Leitfähigkeit:

$$\bar{\alpha} = -e \int \tau \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{v}_k \frac{\partial f^0}{\partial T} d^3k . \quad (2.21)$$

Die Ausdrücke der elektrischen Leitfähigkeit in Gleichung 2.19 und der thermoelektrischen Leitfähigkeit in Gleichung 2.21 zeigen, dass beide Transportkoeffizienten lediglich von der Streuzeit  $\tau$ , der Elektronengeschwindigkeit  $\mathbf{v}_k$  und der Fermi-Verteilung  $f^0$  abhängen.  $\tau$  und  $\mathbf{v}_k$  sind im Allgemeinen abhängig von  $\mathbf{k}$  und können sehr anisotrop sein. Beide Koeffizienten mitteln somit eine Kombination aus Streuzeit und Elektronengeschwindigkeit über den  $\mathbf{k}$ -Raum, jedoch mit unterschiedlicher Gewichtung. Die beiden verschiedenen Ableitungen der Fermi-Verteilung bewirken zum einen, dass  $\bar{\sigma}$  stets positiv ist, während das Vorzeichen von  $\bar{\alpha}$  nicht sofort ersichtlich ist, zum anderen sind sie sensitiv auf unterschiedliche Elektronenzustände nahe des Fermi-Niveaus. Wie in Abbildung 2.2 deutlich wird, ist  $\bar{\sigma}$  sensitiv auf Zustände am Fermi-Niveau, wohingegen  $\bar{\alpha}$  die Zustände über und unter dem Fermi-Niveau mit unterschiedlichem Vorzeichen wichtet.

Um einen Ausdruck für den Wärmestrom zu erhalten, kann man Gleichung 2.17 umschreiben



**Abbildung 2.2:** Qualitative Darstellung der Zustände, über welche die Transportkoeffizienten gemittelt werden für zwei Temperaturen  $T_2 > T_1$ . **(a)** Kern des Integrals der elektrischen Leitfähigkeit in Gleichung 2.19. **(b)** Kern des Integrals der thermoelektrischen Leitfähigkeit in Gleichung 2.21. Die Abbildung ist eine Adaption der entsprechenden Grafik aus Ref. [8].

als [9, 10]

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - f^0 = -\tau \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \left[ -\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{T} \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \cdot \nabla T + e \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \cdot \mathbf{E} \right], \quad (2.22)$$

und man erhält:

$$\mathbf{j}_Q = \int \mathbf{v}_{\mathbf{k}} (\epsilon - \mu) \tau \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \left[ -\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{T} \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \cdot \nabla T + e \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \cdot \mathbf{E} \right] d^3k. \quad (2.23)$$

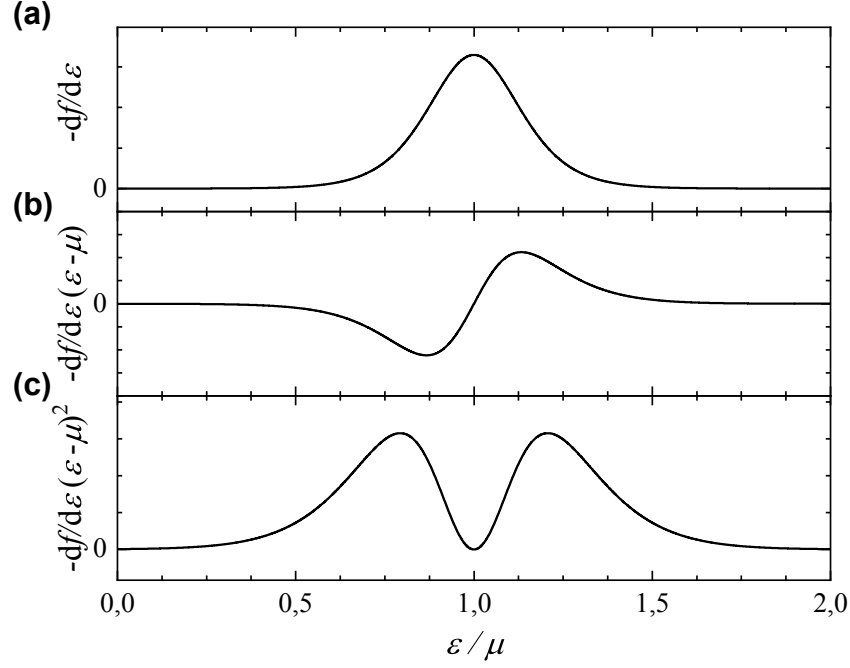
Damit lassen sich, in analoger Vorgehensweise, jeweils unter der Bedingung  $\nabla T = 0$  bzw.  $\mathbf{E} = 0$  mithilfe von Gleichung 2.4 die integralen Ausdrücke der thermoelektrischen Leitfähigkeit und der Wärmeleitfähigkeit herleiten,

$$\bar{\alpha} T = -e \int \tau(\mathbf{k}) \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} d^3k, \quad (2.24)$$

und

$$\bar{\kappa} = - \int \tau(\mathbf{k}) \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \frac{(\epsilon - \mu)^2}{T} \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} d^3k. \quad (2.25)$$

Erneut wird der Zusammenhang zwischen  $\bar{\sigma}$ ,  $\bar{\alpha}$  und  $\bar{\kappa}$  deutlich, welche in den Gleichungen 2.19, 2.24 und 2.25 als Mittelung über Streuzeit und Elektronengeschwindigkeit, gewichtet mit  $\partial f^0 / \partial \epsilon_{\mathbf{k}} \cdot (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^n$ , dargestellt werden. Dabei ist der Exponent  $n$  jeweils 0, 1 oder 2 für  $\bar{\sigma}$ ,  $\bar{\alpha}$  und  $\bar{\kappa}$ . Die verschiedenen Werte von  $n$  bewirken, dass die Transportkoeffizienten auf sehr



**Abbildung 2.3:** Die Transportkoeffizienten  $\bar{\sigma}$ ,  $\bar{\alpha}$  und  $\bar{\kappa}$  unterscheiden sich lediglich in den Elektronenzuständen, über welche eine Kombination aus der Streuzeit und der Elektronengeschwindigkeit gemittelt wird. **(a)** Die elektrische Leitfähigkeit wird über  $\frac{\partial f}{\partial \epsilon}$ , **(b)** die thermoelektrische Leitfähigkeit über  $\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \cdot (\epsilon - \mu)$  und **(c)** die Wärmeleitfähigkeit über  $\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \cdot (\epsilon - \mu)^2$  gemittelt. Die Abbildung ist eine Adaption der entsprechenden Grafik aus Ref. [8].

unterschiedliche Kombinationen von Elektronenzuständen sensitiv sind, wie in Abbildung 2.3 dargestellt ist.

## Magnetotransport

Da der Fokus dieser Arbeit auf den Nebendiagonalelementen von  $\bar{\sigma}$  und  $\bar{\alpha}$  liegt, welche im Normalfall nur in Anwesenheit eines externen Magnetfeldes  $B$  endlich werden, soll an dieser Stelle kurz die Abhängigkeit der Transportkoeffizienten von  $B$  dargestellt werden. Im Rahmen der Boltzmann-Transporttheorie ergeben sich unter der Annahme einer  $\mathbf{k}$ -unabhängigen Mobilität  $\mu_e$  für die longitudinale elektrische Leitfähigkeit  $\sigma_{ii}$  und die transversale elektrische Leitfähigkeit  $\sigma_{ij}$  folgende Ausdrücke [8]:

$$\sigma_{ii} = \frac{\sigma_0}{1 + \mu_e^2 B^2} , \quad (2.26)$$

und

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_0 \mu_e B}{1 + \mu_e^2 B^2} , \quad (2.27)$$

mit

$$\sigma_0 = e^2 \int (\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^2 \tau) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \right) d\mathbf{k} . \quad (2.28)$$

Gleichung 2.26 zeigt das Abfallen der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit in Anwesenheit eines Magnetfeldes, was sich als Magnetwiderstand auswirkt. Gleichung 2.27 beschreibt das Auftreten der Hall-Leitfähigkeit, welche für kleine Felder zunächst linear ansteigt und für große Felder wieder abfällt. Die Unterteilung in kleine und große Felder wird hierbei durch die Elektronenmobilität bestimmt.

Analog verhält sich die thermoelektrische Leitfähigkeit in Anwesenheit eines Magnetfeldes [8]:

$$\alpha_{ii} = \frac{\alpha_0}{1 + \mu_e^2 B^2} , \quad (2.29)$$

und

$$\alpha_{ij} = \frac{\alpha_0 \mu_e B}{1 + \mu_e^2 B^2} , \quad (2.30)$$

mit

$$\alpha_0 = e \int (\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^2 \tau) \left( -\frac{\partial f^0}{\partial T} \right) d\mathbf{k} . \quad (2.31)$$

Dabei beschreibt Gleichung 2.29 das Auftreten des Magneto-Seebeck-Effekts und Gleichung 2.30 den transversalen Peltier-Effekt.

Die Möglichkeit, die Transportkoeffizienten innerhalb des Boltzmann-Formalismus zu berechnen, hängt jedoch von der Kenntnis der Streuzeit und der Elektronengeschwindigkeit und somit von der genauen Bandstruktur eines Festkörpers an jedem  $\mathbf{k}$ -Punkt ab. Die Bandstruktur kann zwar durch Dichtefunktional-Rechnungen bestimmt werden, jedoch ist die Berechnung der Streuzeit beliebig kompliziert, weshalb es meist zu ungenauen Vorhersagen der Transportkoeffizienten kommt und sich somit die Interpretation der Transportmessungen schwierig gestalten kann.

Um dennoch eine Auswertung der Transportmessungen zu ermöglichen, soll im Folgenden die einfachere Darstellung der Transportkoeffizienten im Drude-Modell hergeleitet werden, welches die Elektronen im Festkörper als freies Gas betrachtet, deren Bewegung nur durch Stöße unterbrochen wird. Die Stöße erfolgen näherungsweise innerhalb einer Streuzeit, welche unabhängig von Energie und Impuls der Ladungsträger ist. Diese Näherungen haben sich in vielen Festkörpern mit schwacher Wechselwirkung der Elektronen als nützlich erwiesen und bieten deshalb auch für komplexe Materialien eine Grundlage, um die Ergebnisse einzelner Transportmessungen untereinander zu vergleichen und einzuordnen.

### 2.1.2 Elektrische Leitfähigkeit

Die in diesem Abschnitt hergeleiteten Beziehungen basieren auf dem Drude-Modell im thermischen Gleichgewicht, deshalb soll  $\nabla T = 0$  gelten. Unter der Voraussetzung, dass alle Nebendiagonalelemente des elektrischen Leitfähigkeitstensors  $\bar{\sigma}$  verschwinden, folgt aus Gleichung

2.4 für den elektrischen Transport entlang der  $x$ -Richtung:

$$j_{e,x} = \sigma_{xx} \cdot E_x . \quad (2.32)$$

Auf ein Gas wechselwirkungsfreier Elektronen, welches das Drude-Modell beschreibt, wirkt für jeden Ladungsträger einzeln die Newtonsche Kraftgleichung:

$$\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} . \quad (2.33)$$

Hierbei ist  $m$  die Elektronenmasse,  $\mathbf{v}$  die Geschwindigkeit und  $\mathbf{k}$  der entsprechende Wellenvektor der Elektronen.  $\mathbf{F}$  stellt die Summe aller externen Kräfte dar. Befindet sich das Elektronengas in einem äußeren elektromagnetischen Feld, wirkt die Lorentzkraft:

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) . \quad (2.34)$$

$\mathbf{E}$  ist das elektrische Feld und  $\mathbf{B}$  das Magnetfeld. Die Ladung eines Elektrons beträgt  $q = -e$ , wobei  $e$  die Elementarladung ist. Für  $\mathbf{B} = 0$  ergibt sich hiermit mithilfe von Gleichung 2.33 die Änderung des Wellenvektors aufgrund der wirkenden Kraft als

$$\delta\mathbf{k} = -e \frac{t}{\hbar} \mathbf{E} . \quad (2.35)$$

Die Zustände der Elektronen würden sich also gleichmäßig mit der Zeit im  $\mathbf{k}$ -Raum parallel zum elektrischen Feld verschieben. Jedoch wird jedes Elektron nach der mittleren Streuzeit  $\tau$  wieder zurück gestreut, wodurch sich eine Gleichgewichtsverschiebung der Fermi-Kugel von  $\delta\mathbf{k} = -e \frac{\tau}{\hbar} \mathbf{E}$  ergibt. Die mittlere Geschwindigkeit der Elektronen beträgt demnach:

$$\mathbf{v} = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{m} . \quad (2.36)$$

Daraus ergibt sich für den elektrischen Strom, welcher das Produkt aus Ladungsträgerdichte  $n$ , Ladung  $q$  und mittlerer Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  ist,

$$\mathbf{j}_e = \frac{ne^2\tau}{m} \mathbf{E} . \quad (2.37)$$

Aus dem Vergleich mit Gleichung 2.1 folgt für die longitudinale elektrische Leitfähigkeit:

$$\sigma = \sigma_{xx} = \frac{ne^2\tau}{m} = ne\mu_e , \quad (2.38)$$

mit der Elektronenmobilität  $\mu_e = e\tau/m$ . Diese Beschreibung der elektrischen Leitfähigkeit im Rahmen des Drude-Modells kann ebenfalls aus der Boltzmann-Theorie gewonnen werden, indem man in Gleichung 2.19 das Integral über eine genäherte Zustandsdichte ausführt und die

Ableitung der Fermi-Verteilung als Delta-Funktion annimmt. Unter diesen Näherungen folgt:

$$\sigma = \frac{1}{3} \frac{e^2 \tau}{m \pi^2} k_F^3, \quad (2.39)$$

woraus sich mit  $k_F^3 = 3\pi^2 n$  wieder Gleichung 2.38 ergibt.

### Elektrischer Widerstand

Experimentell einfacher zugänglich, da er nicht auf einer Messung des Stroms sondern der Spannung beruht, ist der elektrische Widerstand. Der spezifische elektrische Widerstand ist der inverse Tensor der elektrischen Leitfähigkeit:

$$\bar{\rho} \equiv \bar{\sigma}^{-1}. \quad (2.40)$$

Da sich Elektronen in Form von Bloch-Wellen ungestört in einem periodischen Potenzial bewegen können, wird ihre Beschleunigung im elektrischen Feld nur durch verschiedene Streuprozesse unterbrochen. Jede Art dieser Streuprozesse verursacht einen Beitrag zum spezifischen Widerstand. Laut der Regel von Matthiessen addieren sich diese Beiträge zum gesamten spezifischen Widerstand und bestimmen so seinen Temperaturverlauf:

$$\rho_{\text{Ges}} = \rho_0 + \rho_{\text{Phononen}} + \rho_i. \quad (2.41)$$

Für niedrige Temperaturen sollten die einzigen relevanten Streuprozesse von Defekten im Kristallgitter herrühren. Das können Störstellen im Gitter, wie zum Beispiel Störatome oder Fehlstellen, oder die Ränder des Kristalls sein. Die so entstehende Reststreuung führt zu einem endlichen Widerstand  $\rho_0$  bei tiefen Temperaturen. An dieser Stelle muss jedoch angemerkt werden, dass sich im Falle einer attraktiven Wechselwirkung der Elektronen ein supraleitender Grundzustand einstellt, in welchem der Widerstand Null wird. Bei endlichen Temperaturen kommt es hingegen zur Anregung von Phononen im Kristallgitter und damit zu Elektron-Phonon-Streuprozessen. Dieser Term kann mithilfe der Boltzmann-Transporttheorie im sogenannten Bloch-Grüneisen-Gesetz beschrieben werden [9]:

$$\rho_{\text{Phononen}} = A \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^5 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^5}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} dx. \quad (2.42)$$

$\theta_D$  ist die Debye-Temperatur. Für  $T \gg \theta_D$  kann das Integral zu  $0,25 \cdot (\theta_D/T)^4$  vereinfacht werden, weshalb dann für den Widerstand gilt:

$$\rho_{\text{Phononen}} \sim T \quad \text{falls} \quad T \gg \theta_D. \quad (2.43)$$



Die in Gleichung 2.41 aufgeführten Beiträge  $\rho_i$  beschreiben weitere Streuprozesse, zum Beispiel die Elektron-Elektron-Streuung, welche die Temperaturabhängigkeit  $\rho_{\text{Elektron}} \sim T^2$  aufweist [12]. Das gleiche quadratische Temperaturverhalten findet man auch für die Streuung der Ladungsträger an Magnonen [13, 14].

### Hall-Effekt

Befindet sich ein Festkörper in einem endlichen Magnetfeld  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ , welches senkrecht zum angelegten elektrischen Feld  $E_y$  steht, kann es zum Auftreten eines elektrischen Stroms  $j_x$ , senkrecht zu beiden Feldern, kommen. Dieses Phänomen ist als Hall-Effekt bekannt. Das Nebendiagonalelement  $\sigma_{xy}$  des elektrischen Leitfähigkeitstensors ist in diesem Fall ungleich Null und vom Magnetfeld abhängig:

$$j_x = \sigma_{xy}(B)E_y . \quad (2.44)$$

Aufgrund des endlichen Magnetfeldes ergibt sich für das Kräftegleichgewicht:

$$q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) = \hbar \left( \frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \delta \mathbf{k} , \quad (2.45)$$

wobei hier bereits die Streuung der Elektronen durch die Streuzeit  $\tau$  berücksichtigt wird. Setzt man die entsprechenden Felder ein, erhält man:

$$E_y = -\frac{qB\tau}{m}E_x . \quad (2.46)$$

Analog zum longitudinalen elektrischen Transport wird in der Praxis die Messung des Hall-Widerstandes  $\rho_{xy} \approx \sigma_{xy}^{-1}$  anstelle der Hall-Leitfähigkeit bevorzugt. Da  $\rho_{xy}$  im Allgemeinen linear vom Magnetfeld abhängt, wird zur Vereinfachung oft der Hall-Koeffizient  $R_H$  angegeben, welcher den Anstieg des linearen  $\rho_{xy}(B)$  repräsentiert:

$$R_H = \frac{\rho_{xy}}{B} \approx \frac{\sigma_{xy}^{-1}}{B} = \frac{E_y}{j_x B} . \quad (2.47)$$

Mithilfe der Gleichungen 2.46 und 2.37 lässt sich der Hall-Koeffizient ausdrücken als:

$$R_H = \frac{1}{nq} . \quad (2.48)$$

Der Hall-Koeffizient hängt also nur von der Ladungsträgerdichte und der Art der Ladungsträger ab. Ist  $R_H$  negativ, bezeichnet man die Leitung als elektronenartig, für einen positiven Hall-Koeffizienten als lochartig.

Sind mehrere Bänder an der Leitung beteiligt, verliert der Ausdruck in Gleichung 2.48 seine Gültigkeit. Die Leitfähigkeit setzt sich dann aus der Summe der Leitfähigkeiten der einzelnen

Bänder zusammen:

$$\bar{\sigma} = \sum_i \bar{\sigma}_i . \quad (2.49)$$

Setzt man den entsprechenden Ausdruck für die elektrische Leitfähigkeit aus Gleichung 2.38 ein und invertiert man die Tensoren, erhält man eine mit den Leitfähigkeiten der einzelnen Bänder gewichtete Summe der einzelnen Hall-Koeffizienten:

$$R_H = \frac{\sum_i R_{H,i} \sigma_i^2}{(\sum_i \sigma_i)^2} . \quad (2.50)$$

Über  $\sigma_i$  hängt der Hall-Koeffizient in einem Mehrband-Leiter also auch von den Streuzeiten und effektiven Massen der einzelnen Bänder ab und ist aufgrund der quadratischen Gewichtung wesentlich sensibler auf Änderungen dieser Größen als der longitudinale elektrische Widerstand.

Das Auftreten des elektrischen Feldes  $E_x$  aufgrund des Hall-Effektes bewirkt, dass sich das gesamte elektrische Feld  $\mathbf{E}_{ges}$  verändert:

$$\mathbf{E}_{ges} = \begin{pmatrix} 0 \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (2.51)$$

Man kann dies durch eine Änderung der Länge des Vektors  $\mathbf{E}_{ges}$  sowie durch eine Drehung um den Winkel  $\theta_H$  beschreiben.  $\theta_H$  wird als Hall-Winkel bezeichnet und stellt eine nützliche Größe zur Auswertung von Hall-Effekt-Daten dar:

$$\tan \theta_H = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}} , \quad (2.52)$$

bzw. in seiner Darstellung als Kotangens:

$$\cot \theta_H = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xy}} = \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xy}} = \frac{\rho_{xx}}{R_H B} . \quad (2.53)$$

Innerhalb des Drude-Modells ergibt sich dafür:

$$\cot \theta_H = \frac{m}{e\tau} \frac{1}{B} . \quad (2.54)$$

Für ein Einband-Modell ist der Hall-Winkel also ein Maß für die effektive Streurrate. In Mehrband-Systemen ist diese Abhängigkeit jedoch nicht einfach festzustellen. Mithilfe der Temperaturabhängigkeit von  $\cot \theta_H$  lassen sich jedoch theoretische Vorhersagen überprüfen. In Hochtemperatur-Supraleitern erhält man allgemein eine Abhängigkeit der Form

$$\cot \theta_H = a + bT^\beta , \quad (2.55)$$

wobei der Exponent theoretisch z.B. für zweidimensionale Luttinger-Flüssigkeiten als  $\beta = 2$  bestimmt wurde [15]. Abweichungen von 2 werden durch Mehrband-Transport herbeigeführt [16]. Dabei ergeben sich in eisenbasierten Supraleitern Exponenten von 2 bis 4, z.B. in Elektron-dotiertem  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  und  $\text{NaFeAs}$  [17, 18].

## Magnetwiderstand

Ausgehend von der oben bereits in ähnlicher Form gezeigten Darstellung des Kräftegleichgewichts in Anwesenheit eines elektrischen Feldes und eines Magnetfeldes,

$$m \left( \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{\mathbf{v}}{\tau} \right) = q (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) , \quad (2.56)$$

ergibt sich (für  $B||z$ ) jeweils für die  $x$ - und  $y$ -Richtung:

$$m \left( \frac{dv_x}{dt} + \frac{v_x}{\tau} \right) = q (E_x + v_y B) \quad (2.57)$$

und

$$m \left( \frac{dv_y}{dt} + \frac{v_y}{\tau} \right) = q (E_y - v_x B) . \quad (2.58)$$

Für ein statisches System ( $dv_x/dt = dv_y/dt = 0$ ) in einem elektrischen Feld entlang der  $x$ -Richtung,  $E = (E_x, 0, 0)$ , gilt somit:

$$v_x = -\frac{e\tau}{m} (E_x + v_y B) \quad (2.59)$$

und

$$v_y = \frac{e\tau}{m} v_x B . \quad (2.60)$$

Mithilfe der Darstellungen der einzelnen Komponenten des elektrischen Stroms,

$$j_{e,x} = \sigma_{xx} E_x = -nev_x \quad (2.61)$$

und

$$j_{e,y} = \sigma_{yx} E_x = -nev_y , \quad (2.62)$$

erhält man die Komponenten der elektrischen Leitfähigkeit

$$\sigma_{xx} = \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \quad (2.63)$$

und

$$\sigma_{yx} = \frac{\sigma_0 \omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \quad (2.64)$$

(vgl. in Abschnitt 2.1.1 dargestellte Gleichungen 2.26 und 2.27), wobei  $\sigma_0 = ne^2\tau/m$  die elektrische Leitfähigkeit im Nullfeld und  $\omega_c = eB/m$  die Zyklotronfrequenz ist. Somit ist nicht nur die Hall-Leitfähigkeit vom Magnetfeld abhängig, sondern auch die longitudinale elektrische Leitfähigkeit. Für große Magnetfelder verhält sich  $\sigma_{xx} \propto B^{-2}$ .

Da, wie oben bereits ausgeführt, in der Praxis bevorzugt der elektrische Widerstand anstelle der elektrischen Leitfähigkeit gemessen wird, muss der Tensor  $\bar{\rho} = \bar{\sigma}^{-1}$  betrachtet werden. Falls keine Anisotropien des Leitfähigkeitstensors existieren, gilt  $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$  und  $\sigma_{yy} = \sigma_{xx}$ , und somit:

$$\bar{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix} = \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2\tau^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau \\ \omega_c\tau & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.65)$$

Daraus ergibt sich der Widerstandstensor als:

$$\bar{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sigma_0} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c\tau \\ -\omega_c\tau & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.66)$$

Für die einzelnen Komponenten erhält man somit

$$\rho_{xx} = \frac{1}{\sigma_0} \quad (2.67)$$

und

$$\rho_{yx} = -\frac{\omega_c\tau}{\sigma_0} = -\frac{B}{ne}. \quad (2.68)$$

Für die hier verwendeten Annahmen ist also  $\rho_{xx}$  unabhängig vom Magnetfeld, somit ist der Magnetwiderstand nicht vorhanden. Ein endlicher Magnetwiderstand kann nur existieren, wenn eine oder mehrere Annahmen dieses vereinfachten Modells nicht korrekt sind. So können zum Beispiel die Streuzeit oder die Elektronenmasse oder beide zugleich abhängig von der Energie sein.

Ein endlicher Magnetwiderstand kann außerdem im Rahmen eines Zweibandmodells erhalten werden. Dabei betrachtet man zwei verschiedene Ladungsträger der jeweiligen Ladung  $q_1$  und  $q_2$ , deren Dispersion aus isotropen parabolischen Bändern besteht. Für beide Arten von Ladungsträgern  $i$  gilt jeweils:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{\sigma_i} \mathbf{j}_{e,i} + \frac{e\tau_i}{m_i} \left( \mathbf{B} \times \frac{1}{\sigma_i} \mathbf{j}_{e,i} \right). \quad (2.69)$$

Der Gesamtstrom ergibt sich als

$$\mathbf{j}_e = \mathbf{j}_{e,1} + \mathbf{j}_{e,2}. \quad (2.70)$$

Analog zum obigen Vorgehen kann man eine Lösung für die Leitfähigkeit (vgl. Herleitung von

Gleichungen 2.63 und 2.64) finden und den Gesamtstrom folgendermaßen ausdrücken:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_e = & \left( \frac{\sigma_1}{1 + \left(\frac{q_1 \tau_1}{m_1}\right)^2 B^2} + \frac{\sigma_2}{1 + \left(\frac{q_2 \tau_2}{m_2}\right)^2 B^2} \right) \mathbf{E} \\ & - \left( \frac{\sigma_1 \frac{q_1 \tau_1}{m_1}}{1 + \left(\frac{q_1 \tau_1}{m_1}\right)^2 B^2} + \frac{\sigma_2 \frac{q_2 \tau_2}{m_2}}{1 + \left(\frac{q_2 \tau_2}{m_2}\right)^2 B^2} \right) \mathbf{B} \times \mathbf{E} \end{aligned} \quad (2.71)$$

Für den Hall-Koeffizienten im Zweibandmodell erhält man [7]:

$$R_H = \frac{R_{H,1} \rho_2^2 + R_{H,2} \rho_1^2 + R_{H,1} R_{H,2} (R_{H,1} + R_{H,2}) B^2}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_{H,1} + R_{H,2})^2 B^2}. \quad (2.72)$$

Hierbei sind  $R_{H,1}$  und  $R_{H,2}$  die jeweiligen Hall-Koeffizienten der beiden Ladungsträger sowie  $\rho_1 = 1/\sigma_1$  und  $\rho_2 = 1/\sigma_2$  die entsprechenden Widerstände. Für Ladungsträger mit unterschiedlichem Vorzeichen der Ladung und gleicher Ladungsträgerkonzentration (also z.B. Elektronen und Löcher,  $R_{H,1} = -R_{H,2}$ ) und  $\rho_1 = \rho_2$  ergibt sich  $R_H = 0$ . Für gleiche Ladungen und gleiche Ladungsträgerkonzentrationen ( $R_{H,1} = R_{H,2} = R$ ) und  $\rho_1 = \rho_2$  erhält man  $R_H = R/2$ , also ein effektives Einband-Verhalten mit doppelter Ladungsträgerkonzentration. Vernachlässigt man die Beiträge  $\propto B^2$ , gelangt man zur Darstellung in Gleichung 2.50:

$$R_H = \frac{R_{H,1} \rho_2^2 + R_{H,2} \rho_1^2}{(\rho_1 + \rho_2)^2} = \frac{R_{H,1} \sigma_1^2 + R_{H,2} \sigma_2^2}{(\sigma_1 + \sigma_2)^2}. \quad (2.73)$$

Für den Magnetwiderstand erhält man [7]:

$$\rho(B) = \frac{\rho_1 \rho_2 (\rho_1 + \rho_2) + (\rho_1 R_{H,1}^2 + \rho_2 R_{H,2}^2) B^2}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_{H,1} + R_{H,2})^2 B^2}. \quad (2.74)$$

Im Falle von identischen Ladungsträgern ( $R_{H,1} = R_{H,2} = R$  und  $\rho_1 = \rho_2$ ) ergibt sich keine Abhängigkeit vom Magnetfeld. Der Widerstand ist dann  $\rho(B) = \rho/2$ , da zwei Ladungskanäle bestehen. Falls eine Kompensation vorherrscht (Elektronen und Löcher,  $R_{H,1} = -R_{H,2}$  und  $\rho_1 = \rho_2$ ), erhält man:

$$\rho(B) = \frac{\rho}{2} + \left( \frac{R^2}{2\rho^2} \right) B^2. \quad (2.75)$$

Der Magnetwiderstand ist also im Rahmen dieser Näherungen in einem kompensierten Metall proportional zu  $B^2$ .

### 2.1.3 Wärmeleitfähigkeit

Um die grundlegenden Eigenschaften der Wärmeleitung zu verstehen, ist eine Beschreibung im Rahmen der kinetischen Theorie möglich, welche die wesentlichen Abhängigkeiten erfasst. Die wärmeleitenden Teilchen werden dabei als ideales Gas betrachtet, wobei ihre Bewegungen nur durch Stöße nach einer mittleren Streuzeit  $\tau$  unterbrochen werden:

$$\tau = \frac{l}{v} . \quad (2.76)$$

In dieser Zeit legt ein Teilchen die mittlere freie Weglänge  $l$  mit der mittleren Geschwindigkeit  $v$  zurück. Im Rahmen dieses Modells wird die thermische Bewegung im Gleichgewicht in allen drei Raumrichtungen äquivalent sein, weshalb der mittlere Teilchenfluss pro Raumrichtung  $\frac{1}{2}nv$  ist. Hierbei stellt  $n$  die Anzahl der Teilchen dar [7, 19].

Betrachtet man ein stabförmiges System, welches entlang der  $x$ -Richtung ausgedehnt ist und an einer Seite auf  $T + \Delta T$  erwärmt wird, so erhöht sich die Energie der Teilchen an der wärmeren Seite. Ihr Energiegewinn in Form von Wärmeenergie  $Q$  kann mit der molaren Wärmekapazität pro Teilchen  $c_m$  ausgedrückt werden, welche über  $c = c_m n$  mit der spezifischen Wärmekapazität  $c$  zusammenhängt. Die zusätzliche Wärmeenergie ist demnach:

$$Q = c_m \Delta T_x . \quad (2.77)$$

Es ergibt sich dadurch ein Wärmestrom  $j_Q$  als:

$$j_{Q,x} = nv_x c_m \cdot \Delta T_x . \quad (2.78)$$

Der Faktor  $\frac{1}{2}$  entfällt hierbei, da der Teilchenfluss in beide Richtungen erfolgt [19]. Während ein Teilchen die freie Weglänge zurücklegt, durchläuft es einen Temperaturunterschied

$$\Delta T_x = -\frac{\partial T}{\partial x} l , \quad (2.79)$$

welcher zusammen mit Gleichung 2.76 zu folgender Darstellung des Wärmestroms führt:

$$j_{Q,x} = -nv_x^2 c_m \tau \frac{\partial T}{\partial x} . \quad (2.80)$$

Gemittelt über alle Dimensionen  $d$  erhält man:

$$\mathbf{j}_Q = -\frac{1}{d} cvl \nabla T . \quad (2.81)$$

Ein Vergleich mit Gleichung 2.2 ergibt somit die Diagonalelemente des Wärmeleitfähigkeitstensors:

$$\kappa_{xx} = \frac{1}{d} cvl . \quad (2.82)$$

Allgemeiner lässt sich die longitudinale Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{xx}$  mithilfe der Boltzmann-Theorie beschreiben (vgl. Abschnitt 2.1.1). Aus Gleichung 2.25 lässt sich ein Ausdruck für  $\kappa_{xx}$  gewinnen, der von der inneren Energie  $u_k$  abhängt [9]:

$$\kappa_{xx} = -\frac{1}{d} \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{1.BZ} v_k^2 \tau_k \frac{d}{dT} u_k dk . \quad (2.83)$$

Dies kann mithilfe der spezifischen Wärmekapazität  $c_k = du_k/dT$  als

$$\kappa_{xx} = -\frac{1}{d} \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{1.BZ} v_k l_k c_k dk \quad (2.84)$$

ausgedrückt werden, was im Falle von Geschwindigkeit und freier Weglänge, die nicht von  $k$  abhängen, analog zu Gleichung 2.82 ist.

Gleichung 2.82 gilt für alle Quasiteilchen, welche Wärme transportieren können. Das können z.B. Phononen, Elektronen oder Magnonen sein. Die Gesamt-Wärmeleitfähigkeit ergibt sich als Summe der einzelnen Beiträge,

$$\kappa = \kappa_{phon} + \kappa_{el} + \kappa_{mag} + \dots , \quad (2.85)$$

wodurch diese in Messungen separiert werden können. Einen Zugang zur Temperaturabhängigkeit der einzelnen Beiträge kann durch Betrachtung der Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität oder der freien Weglänge erfolgen.

## Phononische Wärmeleitfähigkeit

Die phononische Wärmeleitfähigkeit wird für tiefe Temperaturen von der spezifischen Wärmekapazität  $c$  bestimmt, da die freie Weglänge  $l$  als konstant betrachtet werden kann, denn sie hängt nur von der Probengröße und der Probenreinheit ab [7]. Innerhalb der Debye-Näherung zeigt die Wärmekapazität für  $T \ll \theta_D$  eine kubische Temperaturabhängigkeit, weil mit steigender Temperatur immer mehr Phononenmoden besetzt werden und somit zur Wärmeleitung beitragen können [7, 19]. Daraus folgt für die Wärmeleitfähigkeit bei sehr tiefen Temperaturen:

$$\kappa_{xx} \sim T^3 . \quad (2.86)$$

In diesem Temperaturbereich erfolgt die Streuung von Phononen somit lediglich an Defekten oder der Probenoberfläche. Sind mit steigender Temperatur mehr und mehr Phononenmoden besetzt, wird die Phonon-Phonon-Streuung dominant. In diesem Bereich, für den immer noch  $T \ll \theta_D$  gilt, wird die Wärmeleitfähigkeit von der freien Weglänge bestimmt, welche ihrerseits

von der Besetzungswahrscheinlichkeit der Phononen abhängt und somit  $\propto e^{\theta_D/T}$  ansteigt [7]:

$$\kappa_{xx} \sim T^n e^{\theta_D/T}, \quad (2.87)$$

wobei  $n$  im Bereich 0 bis 3 liegt [7]. Für hohe Temperaturen ( $T \gg \theta_D$ ) fällt  $l \propto 1/T$  ab, wodurch auch  $\kappa$  schließlich als

$$\kappa_{xx} \sim \frac{1}{T} \quad (2.88)$$

abfällt.

### Elektronische Wärmeleitfähigkeit

Ist das betrachtete System kein Isolator, so tragen auch Leitungselektronen zur Wärmeleitfähigkeit bei. Die spezifische Wärmekapazität des Elektronengases lässt sich als Variation ihrer inneren Energie nach der Temperatur  $c = \delta U / \delta T$  unter Berücksichtigung der Fermi-Verteilung ausdrücken als [19]

$$c = \frac{1}{2} \pi^2 n k_B^2 \frac{T}{E_F}. \quad (2.89)$$

Daraus folgt für die elektronische Wärmeleitfähigkeit (mit Gleichung 2.82):

$$\kappa_{el} = \frac{\pi^2 n k_B^2 \tau}{3m} \cdot T. \quad (2.90)$$

Die elektronische Wärmeleitfähigkeit hängt, wie die elektronische Leitfähigkeit  $\sigma$ , unter anderem von  $n \cdot \tau / m$  ab, weshalb sich diese Größen eliminieren lassen, indem man  $\kappa_{el}$  durch  $\sigma$  teilt:

$$\frac{\kappa_{el}}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B}{e} \right)^2 T. \quad (2.91)$$

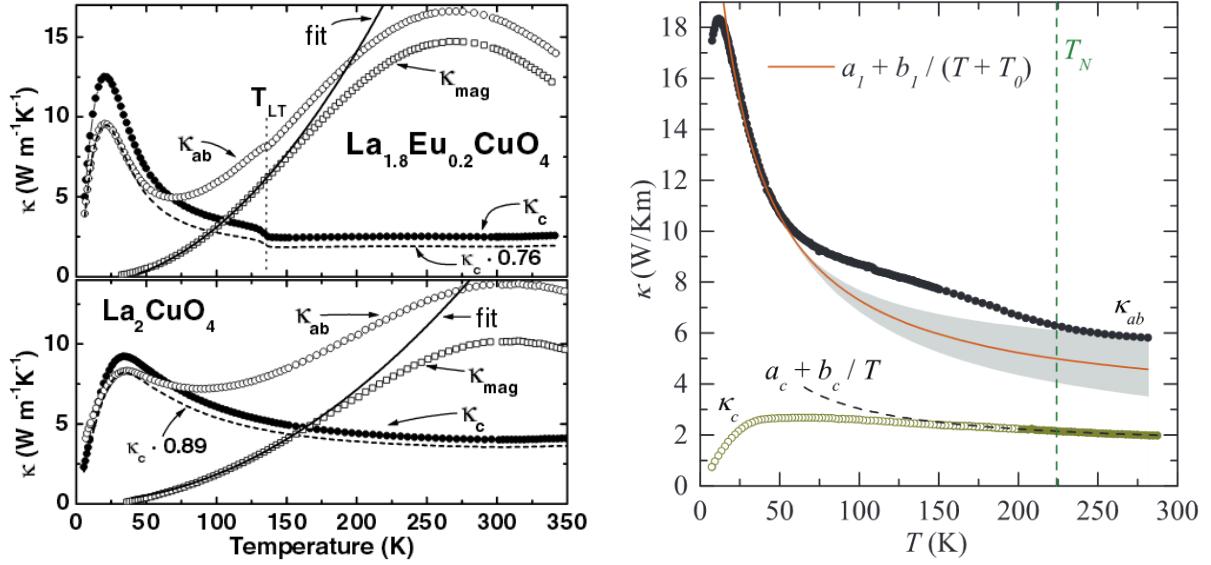
Das Verhältnis hängt somit nur von Naturkonstanten und linear von der Temperatur ab. Ausgedrückt durch den elektrischen Widerstand anstelle der Leitfähigkeit ergibt sich die elektronische Wärmeleitfähigkeit als

$$\kappa_{el} = \frac{LT}{\rho}, \quad (2.92)$$

wobei  $L = \pi^2/3 (k_B/e)^2 = 2,45 \cdot 10^{-8} \text{ W}\Omega\text{K}^2$  ist. Dieser Zusammenhang wird auch als Wiedemann-Franz-Gesetz bezeichnet und erlaubt es bei Kenntnis des elektrischen Widerstands den elektronischen Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit eines Festkörpers zu bestimmen. Gleichung 2.92 lässt sich auch aus den Transportkoeffizienten innerhalb der Boltzmann-Theorie (vgl. Abschnitt 2.1.1) gewinnen. Entwickelt man die Gleichungen 2.19 und 2.25 in der ersten Ordnung nach  $(k_B T)/\epsilon_k$  ergibt sich ebenfalls  $\kappa_{el}/\sigma = (\pi^2/3) (k_B/e)^2 T$ .

In supraleitenden Materialien führt die Bindung von Elektronen zu Cooper-Paaren zu einer reduzierten bzw. verschwindenden elektronischen Wärmeleitfähigkeit, da sich gepaarte Elektronen nicht mehr am Fermi-Niveau befinden und somit nicht angeregt werden können.





(a) Verschiedene Komponenten der Wärmeleitfähigkeit von Eu-dotiertem  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  aus Ref. [20]. Das System repräsentiert einen zweidimensionalen Heisenberg-Antiferromagnet, magnonische Anregungen werden also nur innerhalb der  $ab$ -Ebene erwartet. Der entsprechende Zusatzbeitrag durch in  $\kappa_{ab}$  im Vergleich zu  $\kappa_c$  ist deutlich sichtbar.

(b) Thermische Leitfähigkeit in Abhängigkeit von  $T$  parallel zu den  $ab$ -Ebenen ( $\kappa_{ab}$ , schwarze Punkte) und senkrecht dazu ( $\kappa_c$ , grüne Kreise) von  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  aus Ref. [21]. Die phononische  $1/T$ -Anpassung lässt den magnonischen Beitrag extrahieren.

**Abbildung 2.4:** Verschiedene Beispiele magnonischer Wärmeleitfähigkeit.

Andererseits können Phononen nicht an den kondensierten Cooper-Paaren streuen, wodurch sich der phononische Anteil der Wärmeleitfähigkeit verstärkt. Diese entgegengesetzten Konsequenzen der Supraleitung können zu unterschiedlichem Verhalten der Wärmeleitfähigkeit von Supraleitern unterhalb von  $T_c$  führen. In konventionellen Supraleitern, in denen im Allgemeinen im normalen Zustand der elektronische Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit aufgrund der hohen Ladungsträgerkonzentrationen dominiert, kommt es meist zu einem Abfall von  $\kappa$  in der supraleitenden Phase [22–24], jedoch existieren auch gegenteilige Fälle [25]. In Materialien, welche eine unkonventionelle Supraleitung zeigen, ist meist der phononische Anteil dominant und es kommt zu einem Anstieg der Wärmeleitfähigkeit unterhalb von  $T_c$ . Dieses Verhalten wurde in Kuprat-Supraleitern [26–28], Schwerfermionensupraleitern [29] und eisenbasierten Supraleitern [30–32] nachgewiesen, was in diesem Fall jedoch aus einem ansteigenden Beitrag von lochartigen Quasiteilchen in der supraleitenden Phase zurückzuführen ist [31].

### Magnonische Wärmeleitfähigkeit

Neben elektronischer und phononischer Wärmeleitfähigkeit können noch zusätzliche Beiträge zu  $\kappa$  existieren. Zum Beispiel kann Wärme auch durch Magnonen transportiert werden. Der Nachweis solcher zusätzlicher Beiträge ist am einfachsten in Systemen mit hoher Anisotropie der magnetischen Wechselwirkung. Existiert innerhalb der Ebenen eines geschichteten Materials zum Beispiel eine starke magnetische Wechselwirkung, so können sich Magnonen in dieser Ebene besser ausbreiten als senkrecht zu den Ebenen. Eine Differenz der Wärmeleitfähigkeiten der verschiedenen Kristallrichtungen gibt somit Auskunft über einen solchen Zusatzbeitrag [20, 33]. Eine Unterscheidung vom phononischen Beitrag ist manchmal auch möglich, wenn sich die Energieskalen der Quasiteilchen unterscheiden und die magnonische Wärmeleitfähigkeit im Vergleich zur phononischen Wärmeleitfähigkeit bei höheren Temperaturen maximal wird. Herrscht eine zweidimensionale magnetische Ordnung innerhalb einer Ebene des Kristalls vor, so wird erwartet, dass auch die magnetischen Anregungen nur innerhalb dieser Ebene bestehen. Entsprechend zeigt sich ein zusätzlicher Beitrag in der Wärmeleitfähigkeit nur innerhalb, jedoch nicht außerhalb der Ebene (vgl. Abbildung 2.4a) [20]. Auch lässt sich aus Abweichungen vom für Phononen typischen  $1/T$ -Verhalten auf den magnonischen Beitrag schließen (vgl. Abbildung 2.4b). Aus in dieser Weise extrahierten Beiträgen lassen sich Rückschlüsse auf Eigenschaften der magnetischen Anregungen des Systems ziehen und diese vergleichen [21].

### Righi-Leduc-Effekt

Analog zum elektrischen Leitfähigkeitstensor existieren auch Nebendiagonalelemente des thermischen Leitfähigkeitstensors  $\bar{\kappa}$ , welche in Anwesenheit eines Magnetfeldes endlich werden können. Dieser Effekt wird als Righi-Leduc- bzw. oft in Anlehnung an das elektrische Analogon als thermischer Hall-Effekt bezeichnet. Legt man an einen Festkörper einen Temperaturgradienten entlang der  $y$ -Richtung an, so kann es unter Einfluss eines senkrecht dazu stehenden Feldes  $B_z$  zu einem Wärmestrom in  $x$ -Richtung kommen:

$$j_{Q,x}^{RL} = -\kappa_{xy} \cdot \frac{\partial T}{\partial y} = -\kappa_{xy} \cdot \nabla T_y . \quad (2.93)$$

$\kappa_{xy}$  wird in Analogie zum elektrischen Transport als thermischer Hall-Koeffizient bzw. thermische Hall-Leitfähigkeit bezeichnet. Unter der Voraussetzung, dass sich die longitudinale Wärmeleitfähigkeit aus einem phononischen und einem elektronischen Anteil zusammensetzt, also

$$\kappa_{xx} = \kappa_{phon} + \kappa_{el} , \quad (2.94)$$

kann man im Allgemeinen annehmen, dass nur der elektronische Anteil vom Magnetfeld beeinflusst wird [34]. Diese Annahme soll ebenfalls für die weitere Herleitung in diesem Abschnitt

gelten, jedoch muss angemerkt werden, dass sich Nachweise eines phononischen thermischen Hall-Effekts häufen [35–38].

Die Temperaturgradienten  $\nabla T_x$  und  $\nabla T_y$  werden durch die gesamte Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{xx}$  beeinflusst, jedoch ist  $\kappa_{xy}$  nur elektronischer Natur. Für den Wärmestrom  $j_{Q,x}^{RL}$  ergibt sich also:

$$j_{Q,x}^{RL} = R_L \kappa_{el} B_z \cdot \nabla T_y . \quad (2.95)$$

Dabei geht man davon aus, dass  $\kappa_{xy}$  linear vom Magnetfeld und von  $\kappa_{el}$  über die Proportionalitätskonstante  $R_L$  abhängt, welche auch als Righi-Leduc-Koeffizient bezeichnet wird. Der entstehende Wärmestrom in  $x$ -Richtung wird einen Temperaturgradienten  $\nabla T_x$  hervorrufen, welcher wiederum zu einem ausgleichenden Wärmestrom  $j_{Q,x}^\kappa$  führt,

$$j_{Q,x}^\kappa = -\kappa_{xx} \cdot \nabla T_x , \quad (2.96)$$

so dass der Gesamtwärmestrom im Gleichgewicht verschwindet:

$$j_{Q,x} = j_{Q,x}^{RL} + j_{Q,x}^\kappa = R_L \kappa_{el} B_z \cdot \nabla T_y - \kappa_{xx} \cdot \nabla T_x = 0 . \quad (2.97)$$

Daraus folgt:

$$\kappa_{xy} = -\frac{\nabla T_x}{\nabla T_y} \kappa_{xx} = R_L \kappa_{el} B_z . \quad (2.98)$$

Nimmt man an, dass der phononische Anteil der Wärmeleitfähigkeit vernachlässigbar ist ( $\kappa_{xx} \approx \kappa_{el}$ ), so lassen sich weitere Vereinfachungen anwenden. Aus Gleichung 2.98 folgt damit:

$$R_L B_z = -\frac{\nabla T_x}{\nabla T_y} . \quad (2.99)$$

Nun lässt sich argumentieren, dass das Verhältnis  $-\nabla T_x/\nabla T_y$ , analog zum Verhältnis elektrischer Felder im Falle des Hall-Effekts, durch den Hall-Winkel (vgl. Abschnitt 2.1.2) beschrieben werden kann, da beide Effekte rein elektronischer Natur sind [39]:

$$-\frac{\nabla T_x}{\nabla T_y} = \tan \theta_H = \frac{\rho_{xy}}{\rho_{xx}} . \quad (2.100)$$

Somit kann man den Righi-Leduc-Koeffizienten durch den Hall-Koeffizienten (Gleichung 2.47) ausdrücken [34, 39]:

$$R_L = \frac{\rho_{xy}}{B_z \rho_{xx}} = \frac{R_H}{\rho_{xx}} . \quad (2.101)$$

Im Rahmen eines Einband-Modells ergibt sich mit  $R_H = 1/ne$  (Gleichung 2.48) und dem Widerstand  $\rho_{xx} = m/ne^2\tau$  (Gleichung 2.38):

$$R_L = \frac{e\tau}{m} \quad (2.102)$$

und somit

$$\kappa_{xy} = -\frac{\nabla T_x}{\nabla T_y} \kappa_{xx} = \frac{e\tau}{m} B \kappa_{el} = \omega_c \tau \kappa_{el} , \quad (2.103)$$

wobei  $\omega_c = eB/m$  die Zyklotronfrequenz der Elektronen ist.  $\kappa_{xy}$  kann demzufolge durch Messung von  $\nabla T_x$ ,  $\nabla T_y$  und  $\kappa_{xx}$  bestimmt werden und gibt bei Kenntnis von  $\kappa_{el}$  Auskunft über die Elektronenmasse und die mittlere Streuzeit.

Tragen auch magnetische Anregungen zum Wärmetransport bei, so können in chiralen Spinsystemen und Spin-Flüssigkeiten zusätzliche Beiträge zum thermischen Hall-Effekt bestehen [40–42]. Auch in Kuprat-Supraleitern wurde bereits ein großer thermischer Hall-Effekt sowohl im isolierenden Mott-Zustand der undotierten, als auch bei kritischer Loch-Dotierung gefunden und mit chiralen Anregungen in Verbindung gebracht [43] bzw. chiralen Phononen zugeordnet [38].

#### 2.1.4 Thermoelektrische Leitfähigkeit

Wie bereits zu Beginn dieses Kapitels erläutert, beschreiben die Nebendiagonalelemente der Transportmatrix in Gleichung 2.4 das Auftreten eines elektrischen Stroms  $\mathbf{j}_e$  infolge eines Temperaturgradienten  $\nabla T$  bzw. die Entstehung eines Wärmestroms  $\mathbf{j}_Q$  in Anwesenheit eines elektrischen Feldes  $\mathbf{E}$ . Die jeweiligen Größen sind über den Peltier-Tensor  $\bar{\alpha}$  miteinander verknüpft. Da in der Praxis die Messung einer Spannung bzw. eines elektrischen Feldes einfacher zu realisieren ist, liegt der Fokus hier auf den Komponenten des Tensors  $\bar{S}$ , welcher das Auftreten eines elektrischen Feldes durch einen Temperaturgradienten in Abwesenheit jeglicher Ströme beschreibt (vgl. Abschnitt 2.1, insbesondere die Herleitung von Gleichung 2.7):

$$\mathbf{E} = \bar{S} \cdot \nabla T = \bar{\sigma}^{-1} \bar{\alpha} \cdot \nabla T . \quad (2.104)$$

#### Seebeck-Effekt

Die Diagonalelemente von  $\bar{S}$  in Gleichung 2.104 beschreiben das Auftreten eines elektrischen Feldes entlang eines Temperaturgradienten. Dieser Effekt wird als Seebeck-Effekt und  $S_{ii}$  (mit  $i = x, y, z$ ) als Seebeck-Koeffizient bezeichnet. Durch einen Temperaturunterschied entlang eines Festkörpers besitzen die Elektronen an der wärmeren Seite eine höhere mittlere Geschwindigkeit als jene an der kalten Seite. Der Geschwindigkeitsunterschied resultiert in einer statistischen Bewegung der Ladungsträger in Richtung der kalten Seite, wodurch sich dort dann mehr Elektronen befinden. Das führt zu einem elektrischen Feld, welches sich in Form einer entgegen der Driftbewegung gerichteten Kraft auswirkt. Nach kurzer Zeit sollte sich das System im Gleichgewicht befinden und ein statisches Feld  $E_i$  stellt sich ein.

Liegt der Temperaturgradient in  $x$ -Richtung an, so gilt:

$$E_x = S_{xx} \cdot \nabla_x T . \quad (2.105)$$

Wie in Gleichung 2.104 beschrieben, lässt sich der Seebeck-Koeffizient durch die elektrische und thermoelektrische Leitfähigkeit ausdrücken:

$$S_{xx} = \frac{\alpha_{xx}}{\sigma_{xx}} . \quad (2.106)$$

Entwickelt man im Rahmen der Boltzmann-Theorie (vgl. Abschnitt 2.1.1) die integralen Ausdrücke der Transportkoeffizienten in den Gleichungen 2.19 und 2.24 in der ersten Ordnung nach  $(k_B T)/\epsilon_k$ , so ergibt sich [8]:

$$\alpha_{xx} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{e} T \frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon} \Big|_{\epsilon=\epsilon_F} . \quad (2.107)$$

Daraus kann man für den Seebeck-Koeffizienten schlussfolgern:

$$S_{xx} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{e} T \frac{\partial \ln(\sigma_{xx})}{\partial \epsilon} \Big|_{\epsilon=\epsilon_F} . \quad (2.108)$$

Diese Gleichungen sind auch als Mott-Relation bekannt. Der Seebeck-Koeffizient hängt somit von der Energieabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit an der Fermi-Energie sowie von der Temperatur ab. Für tiefe Temperaturen sollte er sich in erster Näherung linear ( $\propto T$ ) verhalten und für  $T \rightarrow 0$  verschwinden.

Im Rahmen der Näherung eines freien Elektronengases für Temperaturen weit unterhalb der Fermi-Temperatur  $T_F$  (wobei  $\epsilon_F = T_F k_B$ ) lässt sich der Seebeck-Koeffizient als

$$S_{xx} = \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B}{e} \frac{T}{T_F} \quad (2.109)$$

nähern [8], wobei sich aus dem Temperaturanstieg von  $S_{xx}$  die Fermi-Temperatur und -Energie bestimmen lassen. Im Gegensatz zur elektrischen und thermischen Leitfähigkeit hängt der Seebeck-Koeffizient also nicht explizit vom Wert der freien Weglänge bzw. der Streuzeit der Ladungsträger ab (und somit von Defekten im Kristallgitter), sondern von ihrer Energieabhängigkeit. In einem Szenario, in dem höherenergetische Ladungsträger mit einer größeren Wahrscheinlichkeit streuen und somit die Streuzeit mit steigender Energie abnimmt, kann dadurch sogar das Vorzeichen des Seebeck-Koeffizienten beeinflusst werden.

In einem Mehrbandmetall lässt sich der gesamte Seebeck-Koeffizient aus den Koeffizienten der einzelnen Bänder gewichtet mit ihrer elektrischen Leitfähigkeit bestimmen [44]:

$$S = \frac{\sum_i S_i \sigma_i}{\sum_i \sigma_i} . \quad (2.110)$$

Dabei können auch die einzelnen  $S_i$ , entsprechend des Vorzeichens der Quasiteilchenladung oder der Ableitung der elektrischen Leitfähigkeit, unterschiedliche Vorzeichen haben. Ein Rückschluss auf die dominanten Ladungsträger eines Metalls ist demnach im Allgemeinen nicht

möglich.

Ein weiterer Effekt, welcher den Seebeck-Koeffizienten besonders bei tiefen Temperaturen beeinflusst, ist der sogenannte Phonon-Drag. Während am untersuchten Festkörper ein Temperaturgradient anliegt, beeinflusst dieser auch das phononische System. Phononen bewegen sich von der warmen zur kalten Seite, wodurch ein Unterschied der Phononenbesetzung entsteht. Ladungsträger, welche sich entlang des Temperaturgradienten bewegen, erfahren dadurch eine andere Streurate als solche, welche sich entgegen des Gradienten bewegen. Es würde somit ein zusätzlicher Ladungsträgerstrom entstehen, welcher jedoch aufgrund der Randbedingungen ( $\mathbf{j}_e = 0$ ) zu einem verstärkten elektrischen Feld führt. Demzufolge wird der Seebeck-Koeffizient durch den Phonon-Drag überhöht. Dieser Effekt ist für  $T \approx \theta_D/5$  am größten, da bereits ausreichend Phononen angeregt sind, es jedoch noch nicht zur Umklapp-Streuung kommt. In diesem Energiebereich dominiert die Phonon-Elektron-Streuung.

### Nernst-Effekt

Analog zur transversalen elektrischen (Hall-Effekt) und zur transversalen thermischen Leitfähigkeit (Righi-Leduc-Effekt) kann es in Festkörpern zum Auftreten einer transversalen thermoelektrischen Leitfähigkeit kommen. In Anwesenheit eines Magnetfeldes können also auch die Nebendiagonalelemente des Peltier-Tensors  $\bar{\alpha}$  endlich werden. Das Entstehen eines elektrischen Feldes senkrecht jeweils zu einem angelegten Temperaturgradienten und einem Magnetfeld wird als Nernst-Effekt bezeichnet.

Für die Konfiguration eines Temperaturgradienten entlang der  $y$ -Richtung ( $\nabla_y T$ ) und eines gemessenen elektrischen Feldes entlang der  $x$ -Richtung ( $E_x$ ) folgt aus Gleichung 2.104:

$$E_x = S_{xy} \cdot |\nabla_y T| \equiv N \cdot |\nabla_y T|. \quad (2.111)$$

$N$  bzw.  $S_{xy}$  wird als Nernst-Signal bezeichnet (aufgrund unterschiedlicher Konventionen in der Literatur in Bezug auf unterschiedliche Materialklassen werden in dieser Arbeit sowohl  $N$  als auch  $S_{xy}$  verwendet) und kann mithilfe der elektrischen und thermoelektrischen Transportkoeffizienten (falls  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$  und  $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$ ) folgendermaßen ausgedrückt werden (vgl. Gleichung 2.104):

$$N = S_{xy} = (\bar{S})_{xy} = (\bar{\sigma}^{-1} \bar{\alpha})_{xy} = \frac{\sigma_{yy} \alpha_{xy} - \sigma_{xy} \alpha_{yy}}{\sigma_{yy}^2 + \sigma_{xy}^2}. \quad (2.112)$$

Dabei wird  $\alpha_{xy}$  als transversaler Peltier-Koeffizient bzw. als transversale thermoelektrische Leitfähigkeit bezeichnet. Ein endliches Nernst-Signal kann also durch eine Kombination von thermoelektrischer und Hall-Leitfähigkeit (2. Term im Zähler) oder durch eine intrinsische transversale thermoelektrische Antwort des Systems in Form eines endlichen  $\alpha_{xy}$  hervorgerufen werden (1. Term im Zähler). Wie bereits zu Beginn des Abschnitts 2.1.4 beschrieben wurde,

werden in der Praxis bevorzugt die Komponenten des Tensors  $\bar{S}$  anstelle von  $\bar{\alpha}$  gemessen um die direkte Messung von Strömen zu umgehen. Aus dem gleichen Grund werden die Komponenten von  $\bar{\rho}$  anstelle von  $\bar{\sigma}$  gemessen (vgl. Abschnitt 2.1.2). Der transversale Peltier-Koeffizient  $\alpha_{xy}$  lässt sich jedoch aus diesen Transportgrößen bestimmen. Nach Gleichung 2.104 gilt

$$\bar{\alpha} = \bar{\sigma} \bar{S} , \quad (2.113)$$

wobei

$$\bar{\sigma} = \bar{\rho}^{-1} = \frac{1}{\det \bar{\rho}} \begin{pmatrix} \rho_{yy} & -\rho_{xy} \\ -\rho_{yx} & \rho_{xx} \end{pmatrix} = \frac{1}{\rho_{xx}\rho_{yy} - \rho_{xy}\rho_{yx}} \begin{pmatrix} \rho_{yy} & -\rho_{xy} \\ -\rho_{yx} & \rho_{xx} \end{pmatrix} . \quad (2.114)$$

Daraus folgt:

$$\bar{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{xx} & \alpha_{xy} \\ \alpha_{yx} & \alpha_{yy} \end{pmatrix} = \frac{1}{\rho_{xx}\rho_{yy} - \rho_{xy}\rho_{yx}} \begin{pmatrix} \rho_{yy}S_{xx} - \rho_{xy}S_{yx} & \rho_{yy}S_{xy} - \rho_{xy}S_{yy} \\ \rho_{xx}S_{yx} - \rho_{yx}S_{xx} & \rho_{xx}S_{yy} - \rho_{yx}S_{xy} \end{pmatrix} . \quad (2.115)$$

Ein Vergleich der Matrixelemente ergibt:

$$\alpha_{xy} = \frac{\rho_{yy}S_{xy} - \rho_{xy}S_{yy}}{\rho_{xx}\rho_{yy} - \rho_{xy}\rho_{yx}} , \quad (2.116)$$

was, im Falle von  $\rho_{xx} = \rho_{yy}$  und  $\rho_{xy} = -\rho_{yx}$ , in Analogie zu Gleichung 2.112 als

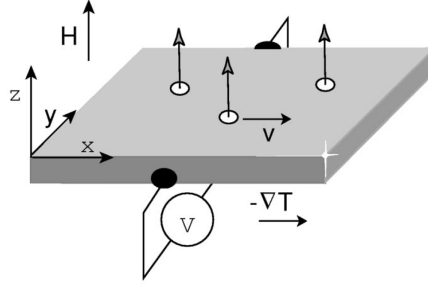
$$\alpha_{xy} = \frac{\rho_{yy}S_{xy} - \rho_{xy}S_{yy}}{\rho_{yy}^2 + \rho_{xy}^2} \quad (2.117)$$

vereinfacht werden kann.

Gleichung 2.111 ist nur dann vollständig, wenn kein Temperaturgradient in  $x$ -Richtung ( $\nabla_x T = 0$ ) auftritt, da andernfalls aufgrund des Seebeck-Effekts ein zusätzlicher Beitrag zu  $E_x$  entsteht. Ein solcher Temperaturgradient kann aufgrund des thermischen Hall-Effekts (vgl. Abschnitt 2.1.3) durch den angelegten Temperaturgradienten  $\nabla_y T$  entstehen und hängt vom elektronischen Beitrag der Wärmeleitfähigkeit ab (siehe Gleichung 2.103).  $\nabla_x T$  (und damit der Beitrag des thermischen Hall-Effekts zum Nernst-Effekt) ist gegenüber  $\nabla_y T$  jedoch zu vernachlässigen, falls der phononische Beitrag die Wärmeleitfähigkeit dominiert.

Des Weiteren ist für die Darstellung des Nernst-Signals in Gleichung 2.111 die Wahl der Vorzeichenkonvention zu beachten. Die in dieser Arbeit gewählte Konvention entspricht der in der Literatur weitverbreiteten Variante, bei welcher ein Beitrag von sich bewegenden magnetischen Flussschläuchen in der Shubnikov-Phase eines Supraleiters zum Nernst-Effekt stets positiv ist. Die entsprechenden Orientierungen der Vektoren sind in Abbildung 2.5 dargestellt.

Ausgehend von der aus der Boltzmann-Theorie (vgl. Abschnitt 2.1.1) folgenden Mott-Relation (Gleichung 2.107), hängen die Tensoren der thermoelektrischen und elektrischen Leitfähigkeit



**Abbildung 2.5:** Verwendete Vorzeichenkonvention des Nernst-Signals. Der rechten Hand-Regel folgend stehen  $-\nabla T$ , das Magnetfeld und das elektrische Feld senkrecht aufeinander. Die sich entlang  $-\nabla T$  (von warm nach kalt) bewegenden Flussschläuche rufen nach Gleichung 2.111 ein positives Nernst-Signal hervor. Abbildung aus Ref. [45].

higkeiten in erster Näherung zusammen mittels [11]

$$\bar{\alpha} = -\frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T}{e} \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \epsilon} \Big|_{\epsilon=\epsilon_F} . \quad (2.118)$$

Daraus folgt mit Gleichung 2.112 und der Definition des Hall-Winkels  $\tan \theta_H = \sigma_{xy}/\sigma_{yy}$ :

$$N = -\frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T}{e} \frac{\partial \tan \theta_H}{\partial \epsilon} \Big|_{\epsilon=\epsilon_F} . \quad (2.119)$$

Laut Gleichung 2.119 ist das Nernst-Signal also direkt proportional zur Temperatur, weshalb meist  $N/T$  bzw.  $S_{xy}/T$  als Messergebnisse angegeben werden. Das daraufhin verbleibende Temperaturverhalten ist auf die indirekte Abhängigkeit der Energieableitung des Hall-Winkels von der Temperatur zurückzuführen. Das Nernst-Signal hängt im wesentlichen von dieser Energieableitung, also von der Änderung des Hall-Winkels nach der Energie am Fermi-Niveau, ab.

Im Falle eines Einbandmodells lässt sich der Hall-Winkel folgendermaßen ausdrücken (vgl. Gleichung 2.54):

$$\frac{\tan \theta_H}{B} = \mu_e = \frac{e\tau}{m^*} . \quad (2.120)$$

Dabei ist  $m^*$  die effektive Masse der Ladungsträger. Es folgt für das Nernst-Signal:

$$N = -\frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T}{m^*} B \frac{\partial \tau}{\partial \epsilon} \Big|_{\epsilon=\epsilon_F} . \quad (2.121)$$

Diese lineare Abhängigkeit des Nernst-Signals vom Magnetfeld gilt für kleine Felder und kleine Ladungsträgermobilitäten, für große Felder und Mobilitäten gilt  $N \propto 1/(\mu_e B)$  (vgl. Gleichung 2.30 in Abschnitt 2.1.1). Um Temperaturabhängigkeiten, welche bei verschiedenen konstanten Magnetfeldern bestimmt wurden, vergleichen zu können, wird deshalb im linearen Bereich oft



der Nernst-Koeffizient  $\nu$  als Anstieg von  $N$  nach  $B$  angegeben:

$$\nu = \frac{N}{B} = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3 m^*} \frac{\partial \tau}{\partial \epsilon} \Big|_{\epsilon=\epsilon_F} . \quad (2.122)$$

Für ein einfaches Metall mit quadratischer Dispersion ( $m^*$  energieunabhängig) und konstanter Streuzeit sind das Nernst-Signal und der Nernst-Koeffizient Null. Der Ausdruck in Gleichung 2.122 kann jedoch in die Irre führen, da er für  $\nu$  eine Abhängigkeit von  $1/m^*$ , und somit einen großen Nernst-Koeffizienten für Systeme mit kleiner effektiver Masse, impliziert. Eine Änderung der effektiven Masse kann jedoch auch einen Einfluss auf die Fermi-Energie haben und somit die Energieableitung der Streuzeit beeinflussen [11]. Dagegen zeigt Gleichung 2.119 die wahre Abhängigkeit des Nernst-Signals von der Energieableitung des Hall-Winkels. Ändert sich  $\theta_H$  im Bereich der Fermi-Energie nicht nach der Energie, so ist das Nernst Signal Null. Dieser Fall, der in den meisten Metallen auftritt, wird auch als Sondheimer-Auslöschung bezeichnet [45]. Sie kann mit einer alternativen Darstellung des Nernst-Signals untersucht werden. Gleichung 2.112 lässt sich mithilfe von  $S_{yy} = \alpha_{yy}/\sigma_{yy}$ , der Näherung  $\sigma_{xy}^2 \ll \sigma_{xx}^2$  und der Definition des Hall-Winkels  $\tan \theta_H = \sigma_{xy}/\sigma_{yy}$  umformen zu:

$$N = S_{xy} = S_{yy} \left[ \frac{\alpha_{xy}}{\alpha_{yy}} - \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{yy}} \right] = \left[ \frac{\alpha_{xy}}{\sigma_{yy}} - S_{yy} \tan \theta_H \right] . \quad (2.123)$$

Tritt die Sondheimer-Auslöschung auf ( $\partial \tan \theta_H / \partial \epsilon = 0$ ), so folgt aus Gleichung 2.118 [11]:

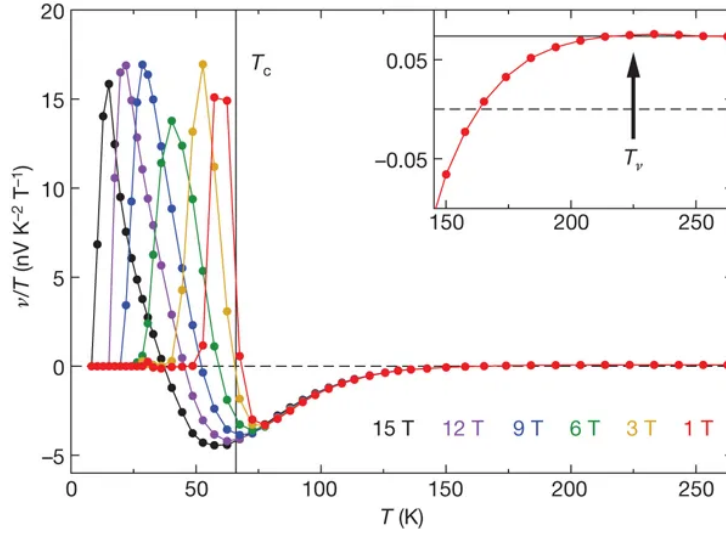
$$\frac{\alpha_{xy}}{\alpha_{yy}} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{yy}} . \quad (2.124)$$

Für den Fall nur eines Leitungsbandes wäre somit  $N = 0$ . Sind jedoch zwei Bänder für den Transport verantwortlich, zum Beispiel ein elektron- und ein lochartiges, gilt:

$$N = \frac{(\alpha_{xy}^+ + \alpha_{xy}^-)(\sigma_{yy}^+ + \sigma_{yy}^-) - (\alpha_{yy}^+ + \alpha_{yy}^-)(\sigma_{xy}^+ + \sigma_{xy}^-)}{(\sigma_{yy}^+ + \sigma_{yy}^-)^2 + (\sigma_{xy}^+ + \sigma_{xy}^-)^2} . \quad (2.125)$$

Dabei markieren die Indizes „+“ die lochartigen und „-“ die elektronenartigen Leitfähigkeiten. Im kompensierten Fall gilt  $\sigma_{xy}^+ = -\sigma_{xy}^-$ . Somit wäre der Hall-Koeffizient  $R_H = 0$  und damit der Hall-Winkel  $\tan \theta_H = 0$ , wodurch man ein verschwindendes Nernst-Signal erwarten würde. In der Tat verschwindet dadurch der zweite Summand in Gleichung 2.125. Gleichung 2.124 gilt dabei separat für jedes Band. Auch wenn  $\alpha_{yy}^+$  und  $\alpha_{yy}^-$  unterschiedliche Vorzeichen aufweisen, so haben aufgrund von Gleichung 2.124  $\alpha_{xy}^+$  und  $\alpha_{xy}^-$  das gleiche Vorzeichen. Somit ist der erste Summand in Gleichung 2.125 nicht Null und ein endliches Nernst-Signal existiert [46]. Das Nernst-Signal ist in dieser Darstellung am größten, wenn der Hall-Koeffizient Null ist. Dieses Szenario der sich verstärkenden Beiträge unterschiedlicher Ladungsträger zum Nernst-Effekt wird deshalb auch Ambipolarität genannt.

Auch im Rahmen eines Einbandmodells kann das Nernst-Signal endlich werden, falls der



**Abbildung 2.6:** Nernst-Koeffizient geteilt durch  $T$  in Abhängigkeit der Temperatur für verschiedene Magnetfelder in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  aus Ref. [47]. Sehr gut sichtbar ist der starke Anstieg des Nernst-Koeffizienten unterhalb von  $T_c$ , welcher auf den Beitrag durch bewegliche Flussschläuche zurückzuführen ist. Mit steigendem Magnetfeld verschiebt sich der Übergang und damit das Maximum von  $\nu/T$  zu niedrigeren Temperaturen.

Hall-Winkel am Fermi-Niveau eine Energieabhängigkeit besitzt [11]. In erster Näherung kann der Term  $\partial \tan \theta_H / \partial \epsilon|_{\epsilon=\epsilon_F}$  in Gleichung 2.119 dann durch  $\tan \theta_H / \epsilon_F$  ersetzt werden. Das würde einer linearen Abhängigkeit von  $\tan \theta_H$  von der Energie an der Fermi-Energie entsprechen. Mithilfe von Gleichung 2.120 ergibt sich für den Nernst-Koeffizienten:

$$\nu = -\frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T}{\epsilon_F} \mu_e. \quad (2.126)$$

Unter diesen Voraussetzungen erkennt man eine Abhängigkeit des Nernst-Koeffizienten von der Mobilität und der Fermi-Energie. Man muss hierbei beachten, dass die Mobilität nicht konstant in der Energie sein darf, da die oben genäherte Ableitung sonst verschwindet. Die Mobilität der Elektronen muss also nicht nur groß, sondern auch abhängig von der Energie sein, um einen messbaren Nernst-Koeffizienten zu erzeugen. Für diesen Fall lässt sich im Rahmen dieser Näherung dann festhalten, dass eine große Mobilität der Ladungsträger und eine kleine Fermi-Energie den Nernst-Koeffizienten verstärken. Dies ist, aufgrund seines halbmetallischen Charakters [48], in elementarem Bismuth der Fall, an welchem das mit Abstand größte Nernst-Signal gemessen wurde [48, 49]. Außerdem reagiert der Nernst-Effekt sehr sensitiv auf Änderungen der Fermi-Fläche (und damit  $\epsilon_F$ ). So kann es zum Beispiel in Materialien mit einem Grundzustand, welcher durch eine Spindichtewelle (SDW) beschrieben wird, zu einer starken Änderung von  $\nu$  am Phasenübergang, an dem die magnetische Ordnung einsetzt, kommen [50, 51]. Da sich durch die einsetzende magnetische Ordnung die Periodizität des Systems verändert, tritt eine Bandrückfaltung auf, wodurch sich die Fermi-Fläche stark verändert.

Ein weiterer Effekt, der ein endliches Nernst-Signal hervorruft, ist die eingangs bereits erwähnte Bewegung von magnetischen Flussschläuchen in Supraleitern 2. Art. Zwischen der Schmelztemperatur des Flussschlauchgitters und  $T_c$  sind die Flussschläuche beweglich und diffundieren deshalb unter dem Einfluss des angelegten Temperaturgradienten. Ihre Bewegung wird durch das senkrechte Magnetfeld abgelenkt und es entsteht ein zusätzlicher Beitrag zum Nernst-Signal, welcher hier als positiv definiert ist (siehe oben). Da normale Ladungsträger im supraleitenden Zustand durch eine Energielücke am Transport gehindert werden, ist dieser Mechanismus der einzige Beitrag zum Nernst-Signal unterhalb von  $T_c$ . Der Beitrag steigt mit sinkender Temperatur zu einem scharfen Maximum an, worauf  $\nu$  am Gefrierpunkt der Flussschläuche steil gegen Null abfällt [46, 47], was in Abbildung 2.6 am Beispiel des Kuprat-Supraleiters  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$  gezeigt ist.

Abgesehen von diesen Effekten erster Ordnung können auch Fluktuationen einen erheblichen Einfluss auf das Nernst-Signal haben. Fluktuationen, welche einem Phasenübergang vorausgehen, können die Fermi-Fläche so verändern, dass der Nernst-Koeffizient bereits oberhalb des Übergangs stark ansteigt [52]. Deshalb werden zum Beispiel ungewöhnliche Anstiege von  $|\nu|$  oberhalb von  $T_c$  in Kuprat-Supraleitern oft auf supraleitende Fluktuationen zurückgeführt [45, 53]. Geschieht dieser Anstieg jedoch bereits sehr weit oberhalb von  $T_c$ , können solche Interpretationen trügerisch sein. Wahrscheinlicher als das Auftreten supraleitender Fluktuationen sind vielmehr Veränderungen auf der Fermi-Fläche, hervorgerufen durch die in Kupraten vermutete Entstehung einer Pseudo-Energielücke („Pseudogap“ genannt), welche sich in Form einer gebrochenen Rotationssymmetrie auf die Transportkoeffizienten auswirkt [54] und an der Bildung der supraleitenden Phase in diesen Materialien beteiligt sein könnte. Die beispielhaft dazu in Abbildung 2.6 gezeigten Daten des Nernst-Koeffizienten in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$  weisen eine klare Abweichung vom normalen Verhalten bei einer Temperatur  $T_\nu$  auf, welche als Pseudogap-Temperatur interpretiert wird [47, 55].

Ein endlicher Nernst-Koeffizient ist somit oft ein Hinweis auf exotische Physik, welche in vielen Fällen noch unverstanden ist. Dass theoretische Modelle im Rahmen klassischer, in der Transporttheorie verwendeter Näherungen, meist weder Temperatur-, Dotierabhängigkeit oder das Vorzeichen von  $\nu$  bzw.  $N$  korrekt vorhersagen können, beweist den Einfluss subtiler Abhängigkeiten auf den Nernst-Effekt [56]. Vor allem für eisenbasierte Supraleiter muss davon ausgegangen werden, dass die Streuzeit sowohl energie- als auch impulsabhängig ist und somit von der Position auf der Fermi-Fläche abhängt. Durch anisotrope Streuung auf den verschiedenen, teilweise elliptischen Fermi-Flächen der eisenbasierten Supraleiter, können Transportkoeffizienten durch sogenannte Streu-Hotspots oder negative Streuzeiten ungewöhnlich verstärkt werden [57, 58]. Damit muss die Theorie jenseits der standardmäßigen Näherungen der Boltzmann-Theorie agieren (vgl. Abschnitt 2.1.1).

## 2.2 Anomaler transversaler Transport

### 2.2.1 Berry-Phase und Berry-Krümmung

Im Jahr 1984 veröffentlichte Michael Berry seine Arbeit über die adiabatische Entwicklung eines Eigenenergie-Zustandes unter langsamer Änderung externer Parameter, welche eine geschlossene Bahn im Parameterraum beschreibt [59]. Das daraus entstandene Konzept der Berry-Phase und der Berry-Krümmung liefert eine elegante Beschreibung verschiedener elektronischer Phänomene im Festkörper [60], wie zum Beispiel des Quanten-Hall-Effekts oder chiraler Spin-Zustände [61], welche nicht durch Symmetriebrechungen erklärt werden konnten. Die folgende Beschreibung folgt im wesentlichen der Darstellungen in Ref. [60] und Ref. [7].

Es wird ein System betrachtet, welches sich durch den Hamilton-Operator  $\mathcal{H}(\mathbf{R})$  beschreiben lässt. Über den Parametervektor  $\mathbf{R} = (R_1, R_2, \dots)$  hängt  $\mathcal{H}$  von der Zeit  $t$  ab und es gilt  $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$ . Solange sich  $\mathbf{R}(t)$  langsam entlang einer Kurve  $\mathcal{C}$  im Parameterraum bewegt (also sich adiabatisch ändert), bleibt das System in einem sich zeitlich ändernden Eigenzustand  $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$  mit der Eigenenergie  $\epsilon_n(\mathbf{R}(t))$ . Wenn keine Entartung des Energiezustandes vorliegt, kann durch die Bewegung im Parameterraum eine zeitabhängige Phase der Wellenfunktion  $|\psi_n(t)\rangle$  aufgesammelt werden:

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)} \cdot \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \epsilon_n(\mathbf{R}(t')) \right] |n(\mathbf{R}(t))\rangle. \quad (2.127)$$

Die zweite Exponentialfunktion beschreibt dabei den sogenannten dynamischen Phasenfaktor. Setzt man nun Gleichung 2.127 in die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)\rangle = \mathcal{H}(\mathbf{R}(t)) |\psi_n(t)\rangle \quad (2.128)$$

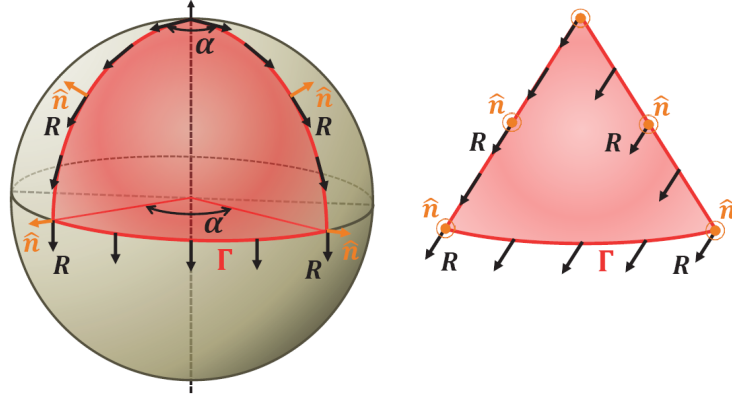
ein und multipliziert von links mit  $\langle n(\mathbf{R}(t))|$ , so erhält man

$$\gamma_n = \int_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \cdot \mathcal{A}_n(\mathbf{R}). \quad (2.129)$$

Hierbei ist

$$\mathcal{A}_n = i \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle \quad (2.130)$$

das Berry-Vektorpotenzial. Die Phase  $\gamma_n$  wird also zusätzlich zur dynamischen Phase beim Durchlauf von  $\mathcal{C}$  aufgesammelt. Lange wurde diese zusätzliche Phase bei der Betrachtung der Zeitentwicklung der Zustände übergangen, da man davon ausging, dass stets eine Eichtransformation gefunden werden könnte, die  $\gamma_n$  verschwinden lässt [62]. Berry zeigte jedoch, dass die Phase vom Pfad  $\mathcal{C}$  abhängt und deshalb  $\gamma_n$  zu einer bestimmten Zeit für verschiedene Pfade



**Abbildung 2.7:** Darstellung des Paralleltransports eines Vektors in zwei verschiedenen geometrischen Umgebungen aus Ref. [7]. Auf der Kugeloberfläche (links) kann ein Vektor, der stets parallel zur Oberfläche steht (schwarze Pfeile), seine Richtung nach dem Durchlaufen eines geschlossenen Pfades ändern. In der Ebene (rechts) bleibt die Richtung erhalten.

unterschiedlich ist. Somit kann eine Eichtransformation, welche  $\gamma_n$  verschwinden lässt, nicht global definiert werden [59]. Nimmt man ferner einen geschlossenen Pfad  $\mathcal{C}$  im Parameterraum an, wenn also nach der Umlaufzeit  $T$  gilt:

$$\mathbf{R}(t_0 + T) = \mathbf{R}(t_0) , \quad (2.131)$$

ergibt sich aus einer beliebigen Eichtransformation:

$$|n(\mathbf{R}(t))\rangle \rightarrow |n'(\mathbf{R}(t))\rangle = e^{-i\chi(\mathbf{R}(t))} |n(\mathbf{R}(t))\rangle . \quad (2.132)$$

Aufgrund des geschlossenen Weges gilt  $e^{-i\chi(t_0)} = e^{-i\chi(t_0+T)}$  und damit  $\chi(t_0) = \chi(t_0 + T) + 2\pi n$ , wobei  $n$  eine ganze Zahl ist. Es folgt daraus

$$\gamma'_n(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \cdot \mathcal{A}_n(\mathbf{R}) = \gamma_n(\mathcal{C}) + 2\pi n . \quad (2.133)$$

Durch eine Eichtransformation lässt sich  $\gamma_n$  also lediglich um ein Vielfaches von  $2\pi$  verändern. Damit ist  $e^{i\gamma_n}$  eichinvariant und somit mit einer physikalischen Observablen verknüpft. Aufgrund dieser Erkenntnis wird  $\gamma_n$  auch als Berry-Phase bezeichnet. Sie hängt nur von  $\mathcal{C}$  und nicht von der Umlaufzeit  $T$  ab und ist deshalb eine geometrische Phase. Dieses Konzept einer geometrischen Phase kann anhand eines Beispiels verdeutlicht werden. Abbildung 2.7 zeigt den Paralleltransport eines Vektors auf einer Kugeloberfläche. Bewegt man einen Vektor, der stets parallel zur Oberfläche einer Kugel sein soll (ohne sich dabei um den Normalenvektor zu drehen), auf einem geschlossenen Pfad, so kann sich der Ausgangs- vom Endzustand des Vektor unterscheiden. In diesem Fall ist der Vektor nach dem Durchlaufen gedreht. Führt man den gleichen Prozess auf einer Ebene durch, so verändert sich der Vektor nicht. Die Drehung

des Vektors entspricht in dieser Veranschaulichung der aufgesammelten Phase, welche stark von der Geometrie der Oberfläche abhängt.

Im Gegensatz zu  $e^{i\gamma_n}$  ist das Berry-Vektorpotenzial von der Eichung abhängig und stellt somit keine physikalische Observable dar. Es lässt sich jedoch die eichinvariante Berry-Krümmung als

$$\mathbf{\Omega}_n(\mathbf{R}) = \nabla_R \times \mathcal{A}_n(\mathbf{R}) \quad (2.134)$$

definieren und damit das Linienintegral in Gleichung 2.129 mithilfe des Stokesschen Theorems in ein Oberflächenintegral über selbige umwandeln:

$$\gamma_n = \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{\Omega}_n(\mathbf{R}). \quad (2.135)$$

Für die Betrachtung von Festkörpern hat es sich als praktischer erwiesen, die differentielle Gleichung 2.134 durch eine Summe über die Eigenzustände zu ersetzen. Unter der Verwendung von Gleichung 2.130 und der Relation  $\langle n | \partial \mathcal{H} / \partial \mathbf{R} | n' \rangle = \langle \partial n / \partial \mathbf{R} | n' \rangle (\epsilon_n - \epsilon_{n'})$  für  $n \neq n'$  erhält man die Kubo-Formel [60, 63]:

$$\mathbf{\Omega}_n(\mathbf{k}) = i\hbar^2 \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \hat{\mathbf{v}} | \psi_{m,\mathbf{k}} \rangle \times \langle \psi_{m,\mathbf{k}} | \hat{\mathbf{v}} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle}{(E_{n,\mathbf{k}} - E_{m,\mathbf{k}})^2}. \quad (2.136)$$

Hierbei ist der  $\mathbf{k}$ -Raum als Parameterraum gewählt und demzufolge die entsprechende Ableitung durch den Geschwindigkeitsoperator  $\hat{\mathbf{v}}$  ersetzt. Zur numerischen Kalkulation der Berry-Krümmung mithilfe von Gleichung 2.136 sind somit lediglich die Eigenzustände aus Bandstrukturrechnungen heranzuziehen [64, 65].

Bewegt man ein geladenes Teilchen auf einem geschlossenen Pfad, welcher einen magnetischen Fluss einschließt, so akkumuliert das Teilchen eine sogenannte Aharonov-Bohm-Phase. Der Aharonov-Bohm-Effekt beschreibt eine solche Bewegung um einen räumlich begrenzten Flussschlauch, sodass das Teilchen keinen Kontakt mit dem Magnetfeld hat, jedoch trotzdem eine solche Phase aufammelt. Das liegt daran, dass zwar das Magnetfeld in der Umgebung des begrenzten Flussschlauches Null ist, nicht jedoch das Vektorpotenzial. Analog dazu können Teilchen im  $\mathbf{k}$ -Raum aufgrund des Berry-Vektorpotenzials eine endliche Berry-Phase auf sammeln, weshalb die Berry-Krümmung als ein Magnetfeld im  $\mathbf{k}$ -Raum identifiziert werden kann. Es ist deshalb nicht verwunderlich, dass die Präsenz einer endlichen Berry-Krümmung auch einen Einfluss auf den Transport von Ladungsträgern hat.

Unter dieser Voraussetzung werden die Bewegungsgleichungen eines Elektrons folgendermaßen modifiziert [60]:

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}} - \dot{\mathbf{k}} \times \mathbf{\Omega}(\mathbf{k}), \quad (2.137)$$

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E} - e\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}. \quad (2.138)$$

Ein sich bewegendes Elektron im elektrischen Feld ( $\mathbf{E} \neq 0 \Rightarrow \dot{\mathbf{k}} \neq 0$ ) erhält einen zusätzlichen Geschwindigkeitsbeitrag proportional und senkrecht zur Impulsänderung  $\dot{\mathbf{k}}$  und zur Berry-Krümmung  $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ , welcher auch als anomale Geschwindigkeit bezeichnet wird.

### 2.2.2 Symmetrieüberlegungen

Aus den Gleichungen 2.137 und 2.138 lassen sich außerdem wichtige Symmetrieüberlegungen für die Berücksichtigung der Berry-Krümmung in realen Systemen ableiten. In Anwesenheit eines elektrischen Feldes ( $\mathbf{B} = 0$ ) folgt für die Geschwindigkeit eines Elektrons im Band  $n$ :

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}). \quad (2.139)$$

Bei einer Zeitumkehr wechseln  $\mathbf{v}_n$  und  $\mathbf{k}$  ihr Vorzeichen, während  $\mathbf{E}$  unverändert bleibt. Unter einer räumlichen Inversion wechseln hingegen  $\mathbf{v}_n$ ,  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{E}$  ihr Vorzeichen. Es folgt somit aus Gleichung 2.139 für ein System, welches Zeitumkehrsymmetrie besitzt, dass die Berry-Krümmung folgende Relation erfüllen muss:

$$\boldsymbol{\Omega}_n(-\mathbf{k}) = -\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}). \quad (2.140)$$

In Anwesenheit einer räumlichen Inversionssymmetrie gilt hingegen:

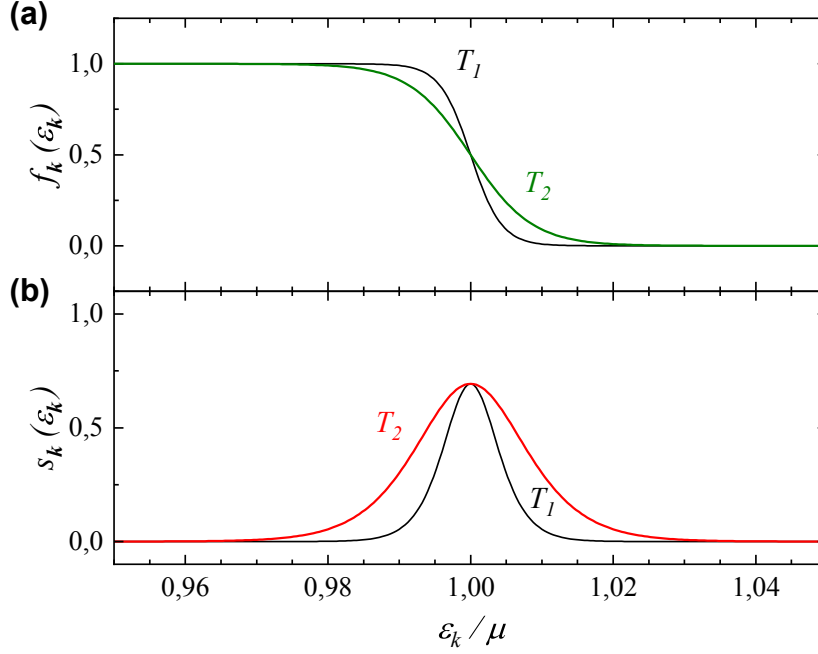
$$\boldsymbol{\Omega}_n(-\mathbf{k}) = \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}). \quad (2.141)$$

In Systemen mit gleichzeitiger Zeitumkehr- und Inversionssymmetrie ist demzufolge in der gesamten Brillouin-Zone  $\boldsymbol{\Omega}_n = 0$  und muss deshalb für die physikalische Betrachtung nicht beachtet werden. Das bedeutet im Umkehrschluss, dass in Materialien mit gebrochener Zeitumkehr- oder Inversionssymmetrie der Berry-Formalismus zur vollständigen Beschreibung des Systems notwendig ist.

### 2.2.3 Anomaler Hall-Effekt

Zeigt die Hall-Leitfähigkeit entgegen ihrer normalen Beiträge (vgl. Gleichung 2.64,  $\sigma_{xy} \propto B$  für kleine und  $\sigma_{xy} \propto 1/B^2$  für große Magnetfelder) einen Beitrag, welcher sich mit steigender Magnetfeldstärke nicht ändert, so spricht man von einer anomalen Hall-Leitfähigkeit  $\sigma_{xy}^A$ . Diese resultiert aus der anomalen Geschwindigkeit, welche in Anwesenheit einer endlichen Berry-Krümmung auftritt (vgl. die Bewegungsgleichungen 2.137 und 2.138 bzw. Gleichung 2.139). Dieser anomale Hall-Effekt wurde in ferromagnetischen Festkörpern bereits kurz nach der Entdeckung des Hall-Effektes bemerkt [66–68] und später auf die anomale Geschwindigkeit zurückgeführt [69], welche nun allgemein durch die Berry-Krümmung beschrieben wird (siehe Abschnitt 2.2.1).

Aufgrund der Bewegungsgleichungen 2.137 und 2.138 entsteht im Rahmen der Boltzmann-



**Abbildung 2.8:** (a) Fermi-Verteilung  $f(\epsilon_{\mathbf{k}})$ , welche dem Kern des Integrals der anomalen Hall-Leitfähigkeit in Gleichung 2.142 entspricht, für verschiedene Temperaturen  $T_2 > T_1$  in Abhängigkeit der Energie. (b) Entropiedichte  $s(\epsilon_{\mathbf{k}})$ , welche dem Kern des Integrals der anomalen Hall-Leitfähigkeit in Gleichung 2.143 entspricht, für verschiedene Temperaturen  $T_2 > T_1$  in Abhängigkeit der Energie.

Theorie (siehe Abschnitt 2.1.1) ein zusätzlicher Term zur transversalen elektrischen Leitfähigkeit, welche sich folgendermaßen darstellen lässt:

$$\sigma_{lm}^A = \frac{e^2}{\hbar} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Omega^n(\mathbf{k}) f_{\mathbf{k}} . \quad (2.142)$$

Dabei ist  $f_{\mathbf{k}} = f(\epsilon_{\mathbf{k}})$  die Fermi-Verteilung. Die anomale Hall-Leitfähigkeit besteht also aus einer Integration der  $k$ -Komponente der Berry-Krümmung über alle besetzten Zustände der Brillouin-Zone.

#### 2.2.4 Anomaler thermoelektrischer Transport

Für den transversalen Peltier-Koeffizienten lässt sich aus der Boltzmann-Theorie (siehe Abschnitt 2.1.1) ein ähnlicher anomaler Beitrag für eine endliche Berry-Krümmung in Abwesenheit eines Magnetfeldes herleiten [70]:

$$\alpha_{lm}^A = \frac{k_B e}{\hbar} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Omega^n(\mathbf{k}) s_{\mathbf{k}} . \quad (2.143)$$

Hierbei ist  $s_{\mathbf{k}} = -f_{\mathbf{k}} \ln f_{\mathbf{k}} - [(1 - f_{\mathbf{k}}) \ln(1 - f_{\mathbf{k}})]$  die Entropiedichte, welche im Bereich der größten Änderung der Fermi-Verteilung  $f_{\mathbf{k}}$  maximal wird. Abbildung 2.8 zeigt  $f_{\mathbf{k}}$  und  $s_{\mathbf{k}}$



im Vergleich in Abhängigkeit der Energie für zwei verschiedene ausgewählte Temperaturen  $T_2 > T_1$ .  $s_{\mathbf{k}}$  ist nur in einem kleinen Bereich der Größenordnung  $k_B T$  um die Fermi-Energie verschieden von Null, während  $f_{\mathbf{k}}$  (bis auf besagten Bereich um die Fermi-Energie) unterhalb der Fermi-Energie 1 und oberhalb Null ist. Somit wird  $\alpha_{lm}^A$ , aufgrund der Gewichtung des Integrals durch  $s_{\mathbf{k}}$  in Gleichung 2.143, lediglich von Zuständen in der Nähe der Fermi-Energie beeinflusst. Aufgrund der Gewichtung des Integrals durch  $f_{\mathbf{k}}$  in  $\sigma_{lm}^A$  wird zwar über alle besetzten Zustände summiert, jedoch wird das Ergebnis letztlich auch nur durch Zustände in der Nähe der Fermi-Energie bestimmt, da sich der Beitrag tiefer liegender Zustände aufgrund von Symmetrieeigenschaften der Berry-Krümmung aufhebt [71]. Trotzdem unterscheiden sich die Integrale und damit die anomalen Transportkoeffizienten aufgrund der unterschiedlichen Gewichtung innerhalb der thermischen Verbreiterung der Fermi-Energie (vgl. Abbildung 2.8).

## 3 Messaufbau und -methoden

### 3.1 Messsystem

Für die Messungen der in dieser Arbeit vorgestellten Transportkoeffizienten benötigt man ein Messsystem, welches in einem großen Bereich von Raumtemperatur bis zu tiefen Temperaturen in Abhängigkeit der Temperatur und des Magnetfeldes arbeitet. Damit im Falle der Messung der Wärmeleitfähigkeit bzw. des thermoelektrischen Transports sichergestellt werden kann, dass Wärmeverluste durch die Umgebung minimal sind, werden Messstäbe verwendet, welche im Inneren evakuiert werden können.

Abbildung 3.1 zeigt eine schematische Darstellung eines solchen Messstabs. Am unteren Ende befindet sich der Probenhalter, welcher von einem Innenbecher zum Strahlenschutz und einer Heizkappe (auch Heizbecher genannt) umgeben ist. Die Heizkappe wird zusammen mit einem CERNOX Temperatursensor auf dem Probenhalter verwendet, um die Temperatur einzustellen und konstant zu halten. Die entsprechende Steuerung beider Einheiten erfolgt durch einen Temperaturregler (Lakeshore 340 Temperature Controller), welcher auch zur Messung der Temperatur des Wärmebads genutzt wird. Die elektrischen Verbindungen zur Messung und Steuerung verlaufen durch den Messstab nach oben und können dort mit den Messgeräten verbunden werden. Dieser Aufbau ermöglicht die Platzierung des gesamten Messsystems in einem Kryostaten (Oxford Kryostat) in einem Bad aus flüssigem Helium und im Zentrum eines supraleitenden Magneten, welcher maximale Felder  $B_{max}$  von 15 T bei 4,2 K bzw. 17 T bei 2,2 K erzeugen kann. Somit können Temperaturen von  $\approx 2,2$  K bis 300 K sowie beliebige Magnetfelder zwischen  $+B_{max}$  und  $-B_{max}$  an der Probenposition eingestellt werden, wodurch Messungen in Abhängigkeit dieser beiden Größen möglich sind. Entscheidend dafür ist die thermische Ankopplung des Probenhalters über eine Kühlstufe an das flüssige Helium, welches eine Temperatur von 4,2 K besitzt. Somit wird aus dem Inneren konstant Wärme abgeführt. Dieser Wärmeverlust kann durch die Heizkappe ausgeglichen werden, wodurch im gesamten Temperaturbereich eine konstante Temperatur abhängig vom Strom durch die Heizkappe eingestellt werden kann. Um Temperaturen  $< 4,2$  K zu erreichen, kann an der Lambda-Stufe des Kryostaten gepumpt werden. Dadurch sinkt der Druck im Heliumbad und die Temperatur sinkt auf 2,2 K. Aufgrund des höheren Abtransportes der Wärme sinkt somit auch die Temperatur des Probenhalters weiter ab.

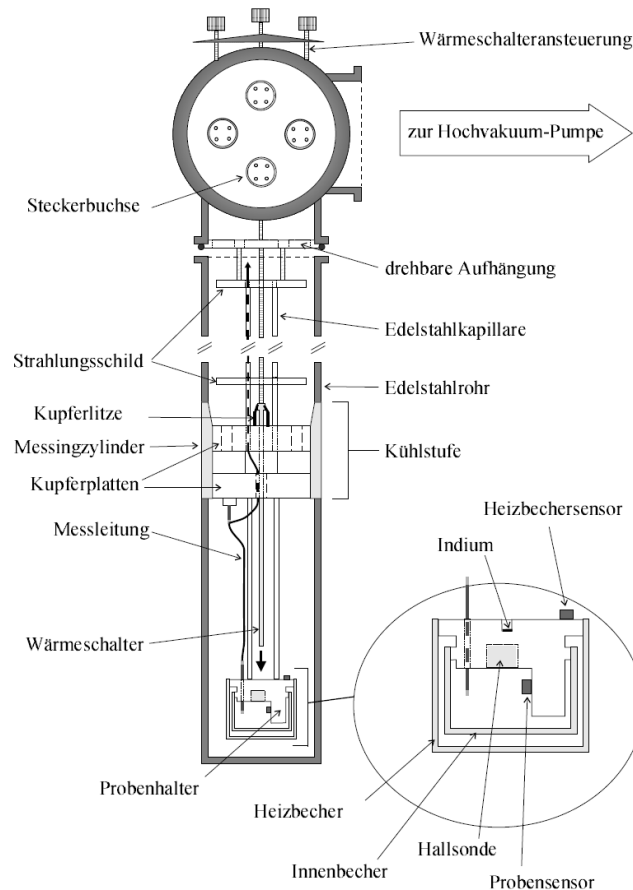


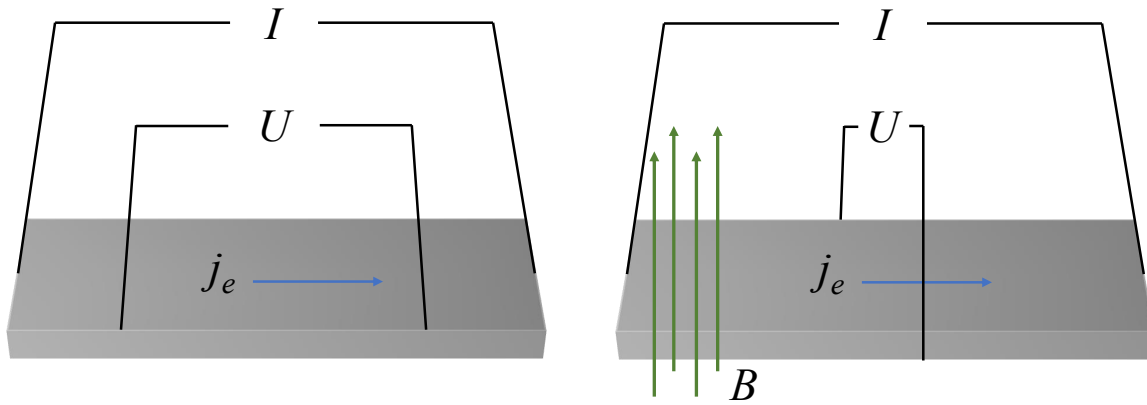
Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau eines Transport-Messtabes aus Ref. [72].

## 3.2 Messmethoden

Da es sich bei den in Kapitel 2 hergeleiteten Transportkoeffizienten um physikalische Größen erster Ordnung handelt, muss bei Messungen stets ein thermisches Gleichgewicht hergestellt werden. Nachfolgend werden die Methoden der in dieser Arbeit vorgestellten Transport-Messungen erläutert.

### 3.2.1 Widerstand und Hall-Effekt

Für Messungen der elektrischen Transportkoeffizienten muss stets sichergestellt werden, dass kein Temperaturgradient an der Probe anliegt, da dieser zu einer zusätzlichen Seebeck-Spannung führen kann (vgl. Kapitel 2.1.4). Dazu wird die Probe flach mithilfe eines isolierenden doppelseitigen Klebebandes oder GE Varnish auf das Wärmebad des Messtabes aufgeklebt. In Abbildung 3.2a ist die schematische Kontaktierung einer Probe zur Messung des elektrischen Widerstandes dargestellt. Eine Stromquelle (Keithley 6221 DC and AC current source) induziert über die beiden Kontakte an den Seiten der Probe einen konstanten und homogenen Strom im Kristall. Um dies zu garantieren, werden die zwei gegenüberliegende Seiten der Probe komplett mit einem elektrisch leitenden Kleber (Silberepoxydkleber, Epo-tek H20E) bedeckt.



(a) Schematischer Aufbau zur Messung des elektrischen Widerstands. Ein Strom  $I$  wird durch die Probe geschickt und ruft eine Spannung  $U$  hervor, welche entlang der Stromrichtung gemessen wird.

(b) Schematischer Aufbau zur Messung des Hall-Effekts. Senkrecht zu einem Strom  $I$  wird ein externes Magnetfeld  $B$  angelegt. Senkrecht zu beiden wird die Hall-Spannung gemessen.

**Abbildung 3.2:** Messaufbauten für elektrische Transportmessungen.

Über zwei separate Kontakte auf der Probenoberfläche, welche möglichst parallel und mit wenig Kleber aufgebracht werden, wird die entstehende Spannung gemessen. Durch eine solche Vierpunktmessung wird garantiert, dass aufgrund der hohen Eingangsimpedanz des Spannungsmessgerätes (Keithley 2182 Nanovoltmeter) kein Strom durch den Spannungsstromkreis fließt. Somit wird nur der Widerstand der Probe zwischen den beiden Spannungskontakten gemessen. Im Fall einer Zweipunktmessung würde man hingegen zusätzlich den Widerstand der Kabelverbindungen und Klebestellen messen.

Der Aufbau zur Messung des Hall-Effekts ist in Abbildung 3.2b dargestellt. Im Unterschied zur Messung des longitudinalen elektrischen Widerstands wird die Spannung hier senkrecht zum Stromfluss an zwei gegenüberliegenden Seiten der Probe abgenommen.

In beiden Konfigurationen wird beim Messvorgang mithilfe der Stromquelle ein Strom  $I$  durch die Probe geleitet. Nachdem der Strom stabilisiert ist (Wartezeit  $< 0,2$  s) wird die über die Spannungskontakte aufgenommene Spannung für 2 s gemittelt, woraus der Wert  $U_{\rightarrow}$  resultiert. Anschließend wird ein entgegengesetzter Strom  $-I$  durch die Probe geleitet, woraus analog die Spannung  $U_{\leftarrow}$  resultiert. Dieser Richtungswechsel wird vollzogen, um intrinsische elektrische Spannungen in der Probe herauszurechnen, welche zum Beispiel aufgrund nicht verschwindender thermischer Gradienten entstehen können. Man erhält den Messwert der Spannung  $U$  durch Mittelung der beiden Einzelmessungen:

$$U = \frac{U_{\leftarrow} + U_{\rightarrow}}{2} . \quad (3.1)$$

Während der gesamten Messzeit wird die Temperatur des Wärmebads aufgenommen (Lakes-

hore 340 Temperature controller) und anschließend gemittelt. Somit erhält man die Datensätze  $T$ ,  $I$  und  $U$  um den Widerstand in Abhängigkeit der Temperatur zu bestimmen:

$$R_{xx}(T) = \frac{U}{I} . \quad (3.2)$$

Mithilfe der Probengeometrie kann man daraus den spezifischen longitudinalen Widerstand in Abhängigkeit der Temperatur bestimmen:

$$\rho_{xx}(T) = R_{xx}(T) \cdot \frac{bd}{l} = \frac{U}{I} \cdot \frac{bd}{l} , \quad (3.3)$$

wobei  $b$  die Breite und  $d$  die Dicke der Probe sind, also zusammen die Querschnittsfläche ergeben, durch welche der Strom fließt.  $l$  beschreibt den Abstand der Spannungskontakte und somit die Länge des untersuchten Probenabschnitts.

Zur Messung des Hall-Effekts wird die gleiche Methodik verwendet, für jeden Messpunkt wird also die Spannung für beide Stromrichtungen gemittelt. Durch Anlegen eines Magnetfeldes  $B$  senkrecht zur Stromrichtung entsteht die senkrecht zu diesen beiden Größen orientierte, gewünschte Hall-Spannung  $U_{xy}$ . Da es jedoch vorkommen kann, dass die Kontakte zur Messung der Hall-Spannung nicht exakt einander gegenüber liegen, kann entlang der Stromrichtung ebenfalls eine longitudinale Spannung  $U_{xx}$  entstehen. Um diese Größe herauszurechnen, wird jede Spannung bei einem Magnetfeld  $B$  zusätzlich beim umgekehrten Feld  $-B$  aufgenommen. Durch das invertieren des Magnetfeldes ändert sich das Vorzeichen der Hall-Spannung, die longitudinale Spannung ändert sich jedoch nicht, weshalb man  $U_{xy}$  folgendermaßen bestimmen kann:

$$U_{xy}(|B|) = \frac{U(B) - U(-B)}{2} = \frac{(U_{xx} + U_{xy}) - (U_{xx} - U_{xy})}{2} . \quad (3.4)$$

Somit kann der Hall-Widerstand  $R_{xy}$  in Abhängigkeit von  $T$  und  $|B|$  bestimmt werden:

$$R_{xy}(|B|, T) = \frac{U_{xy}(|B|)}{I} . \quad (3.5)$$

Den spezifischen Hall-Widerstand  $\rho_{xy}$  erhält man schließlich durch Multiplikation mit der Dicke  $d$ :

$$\rho_{xy}(|B|, T) = R_{xy}(|B|, T) \cdot d = \frac{U_{xy}(|B|)}{I} \cdot d . \quad (3.6)$$

Misst man  $\rho_{xy}$  bei konstanter Temperatur in Abhängigkeit des Magnetfeldes, so ergibt sich der Hall-Koeffizient  $R_H$  aus dem Anstieg von  $\rho_{xy}(|B|)$  (vgl Gleichung 2.47):

$$\rho_{xy}(|B|) = R_H \cdot |B| . \quad (3.7)$$

### 3.2.2 Wärmeleitfähigkeit

Um einen elektrischen Strom durch den Kristall zu verhindern, wird die Probe zur Messung der Wärmeleitfähigkeit mithilfe eines elektrisch isolierenden, jedoch thermisch gut leitenden Klebers (GE Varnish oder Deltabond 152 Blue Epoxy mit Härter A4) auf das Wärmebad des Messstabes platziert. Abbildung 3.3a zeigt schematisch den Messaufbau einer Wärmeleitfähigkeitsmessung. Auf die Oberseite der Probe wird ein SMD-Widerstand mit  $R = 2,8 \text{ k}\Omega$  geklebt, welcher als Heizer fungiert. An diesen werden Manganindrähte gelötet, um einen Strom  $I_h$  hindurch zu leiten und mittels einer Vierpunktmessung die entstehende Heizerspannung  $U_h$  zu messen. Aus diesen Größen lässt sich die Heizleistung bestimmen:

$$P_h = U_h \cdot I_h . \quad (3.8)$$

Aufgrund der induzierten Heizleistung erwärmt sich die Oberseite der Probe und es entsteht ein Temperaturgradient  $\nabla T$ . Die Temperatur des Wärmebads soll hier als  $T_b$  und die Temperatur des Heizers als  $T_h$  bezeichnet werden. Aufgrund des Temperaturgradienten entsteht in der Probe ein Wärmestrom  $j_Q$ . Mithilfe eines Thermoelements wird der Temperaturunterschied zwischen zwei Punkten entlang des Temperaturgradienten auf der Probe gemessen. Das Thermoelement besteht aus einem Au-Draht mit 0,07 at.% Fe und zwei Chromel-P-Drähten (Leico Industries Inc.) mit einem Durchmesser von  $76 \text{ }\mu\text{m}$ . Es wird ebenfalls elektrisch isolierend und gut thermisch leitend auf die Probe geklebt. Durch den Temperaturunterschied an den beiden Klebepunkten des Thermoelements entsteht in diesem aufgrund des Seebeck-Effekts (vgl. Kapitel 2.1.4) eine Thermospannung. Um zu verhindern, dass eventuelle intrinsische Temperaturgradienten einen Einfluss auf die Messung haben, wird in einem Messschritt zuerst die Spannung bei ausgeschaltetem und anschließend bei eingeschaltetem Heizer gemessen. Aus der Differenz erhält man die Spannung  $U_{tc}$ , welche über die Kalibrierung des Seebeck-Koeffizienten des Thermoelements zum Temperaturunterschied  $\Delta T$  führt:

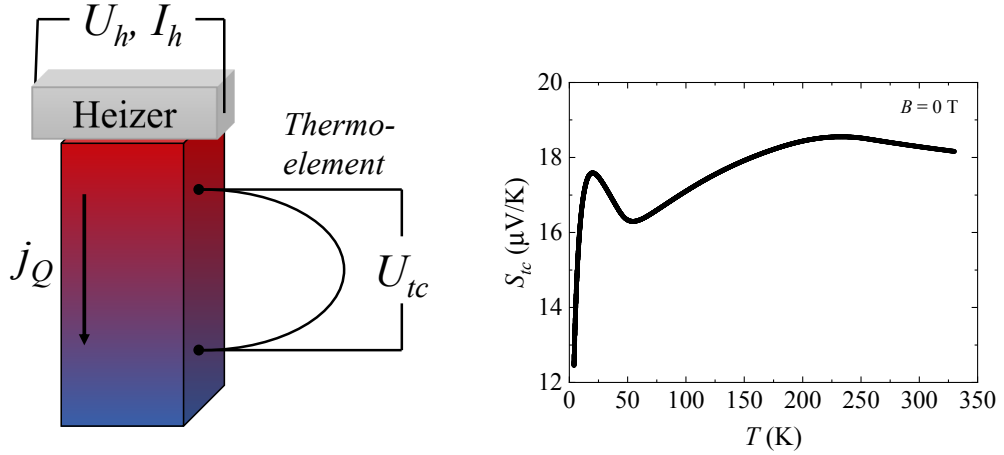
$$\Delta T = \frac{U_{tc}}{S_{tc}} . \quad (3.9)$$

Die Kalibrierung des Thermoelements ist in Abbildung 3.3b dargestellt. Entsprechend Gleichung 2.2 ergibt sich die Wärmeleitfähigkeit  $\kappa$  als:

$$\kappa = -\frac{j_Q}{\nabla T} . \quad (3.10)$$

Der Temperaturgradient lässt sich mithilfe des gemessenen Temperaturunterschieds bestimmen:

$$\nabla T = \frac{\Delta T}{l} , \quad (3.11)$$



(a) Schematischer Aufbau zur Messung der Wärmeleitfähigkeit. Durch einen Heizer wird ein Wärmestrom in einer Probe induziert. Der dadurch entstehende Temperaturgradient wird mithilfe eines Thermoelements gemessen.

(b) Kalibrierung des Seebeck-Effekts des Thermoelements in Abhängigkeit der Temperatur.

**Abbildung 3.3:** Messaufbau und Kalibrierung für thermische Transportmessungen.

wobei  $l$  der Abstand der Thermoelement-Kontakte ist. Unter der Annahme, dass die gesamte Heizleistung  $P_h$  in Form eines Wärmestroms durch die Probe transportiert wird, ergibt sich:

$$j_Q = \frac{P_h}{b \cdot d}, \quad (3.12)$$

mit der Dicke  $d$  und der Breite  $b$  der Probe, welche den Querschnitt bestimmen. Somit folgt für die gemessene Wärmeleitfähigkeit:

$$\kappa_m(T_P) = \frac{P_h \cdot l}{\Delta T \cdot b \cdot d}. \quad (3.13)$$

$T_P$  ist die Temperatur in der Mitte der Probe und ergibt sich aus der gemessenen Temperatur des Wärmebads  $T_b$  sowie der Höhe der Probe  $h$ , dem Abstand der Thermoelement-Kontakte  $l$  und dem gemessenen Temperaturunterschied:

$$T_P = T_b + \frac{1}{2} \frac{h}{l} \Delta T. \quad (3.14)$$

Gleichung 3.13 gilt dabei nur, wenn die gesamte Heizleistung über die Probe ins Wärmebad fließt. In der Realität kann jedoch ein Teil der Heizleistung verloren gehen. Die Manganindrähte, welche die elektrische Verbindung zum Heizer herstellen, erwärmen sich ebenfalls aufgrund ihres Widerstands. Dieser ist jedoch im Vergleich zu  $R_h$  vernachlässigbar klein. Auch können sie die Wärme ableiten, wobei der Wärmefluss durch die Drähte weit unter 0,1 % im

Vergleich zum Wärmeflusses durch die Probe beträgt [73]. Auch der Wärmefluss durch das Thermoelement ist  $< 1 \%$  [74] und kann somit vernachlässigt werden. Es verbleibt der Verlust aufgrund von Wärmestrahlung. Laut dem Stefan-Boltzmannschen Gesetz für graue Strahler ist die abgestrahlte Leistung [75]:

$$P_S = \epsilon(T) A_{O,ges} \sigma (T_P^4 - T_b^4) . \quad (3.15)$$

Hierbei ist  $\sigma$  die Stefan-Boltzmann-Konstante,  $\epsilon$  der Emissionsgrad und  $A_{O,ges}$  die Fläche der gesamten strahlenden Oberfläche, welche aus Heizer- und Probenoberfläche besteht. Da die Probe jedoch einen Temperaturgradienten aufweist, muss über die Probenoberfläche integriert werden. Man erhält schließlich [72]:

$$P_S = 4\sigma \left( (b+d)\epsilon \frac{h^2}{l} + A_{O,h}\epsilon \frac{h}{l} \right) T_b^3 \delta T : CT_b^3 \delta T . \quad (3.16)$$

Hierbei beschreiben wieder  $b$ ,  $d$  und  $h$  die Probengeometrie.  $A_{O,h}$  ist die Oberfläche des Heizers und es wird  $\epsilon = 1$  (Schwarzkörperstrahlung) angenommen. Somit folgt für die eigentliche Wärmeleitfähigkeit der Probe:

$$\kappa_P(T_P) = \kappa_m(T_P) - CT_b^3 \frac{l}{A_{O,ges}} . \quad (3.17)$$

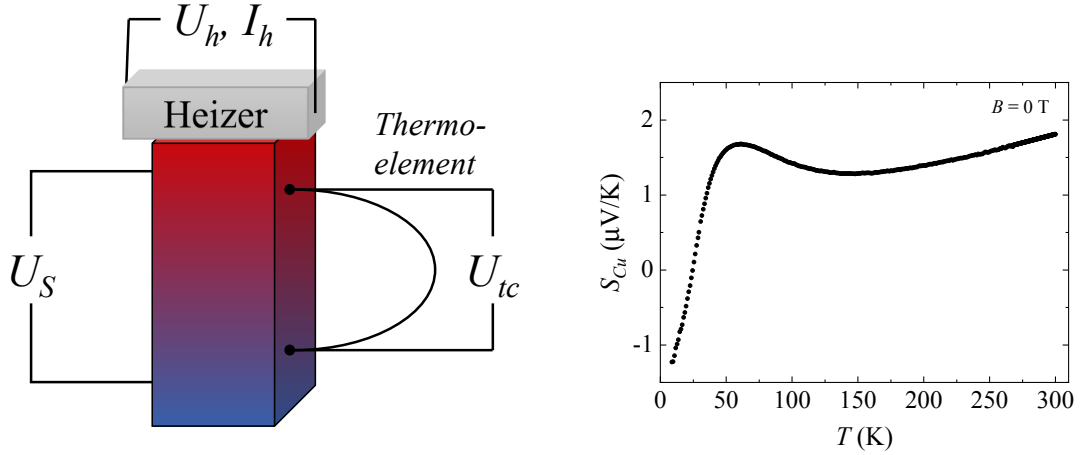
Dieser Unterschied zwischen dem wahren Wert der Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_P$  und dem gemessenen Wert  $\kappa_m$  skaliert mit  $T_b^3$  und ist deshalb besonders groß für hohe Temperaturen. Bei Raumtemperatur kann dieser in der Größenordnung von 10 % liegen.

#### 3.2.3 Seebeck-Effekt

Der Messaufbau zur Messung des Seebeck-Effekts ist in Abbildung 3.4a dargestellt. Der Unterschied zur Messung der Wärmeleitfähigkeit besteht nur in einem zusätzlichen Paar elektrischer Kontakte, welche die Seebeck-Spannung  $U_S$  entlang des Temperaturgradienten auf der Probe messen. Analog zur Messung der Spannung des Thermoelements wird auch für die Bestimmung von  $U_S$  die Differenz aus der Spannung bei jeweils ein- und ausgeschaltetem Heizer verwendet. Bei der Ermittlung des Seebeck-Koeffizienten der Probe muss jedoch der Seebeck-Koeffizient der Kupferdrähte  $S_{Cu}$  berücksichtigt werden. Eine Kalibrierung von  $S_{Cu}$  in Abhängigkeit der Temperatur wird in Abbildung 3.4b gezeigt. Um den Seebeck-Koeffizienten der Probe  $S_P$  zu bestimmen, soll im Folgenden angenommen werden, dass der *High*-Eingang des Voltmeters zur Messung von  $U_S$  mit der wärmeren Seite der Probe verbunden ist (oberer Kontakt in Abbildung 3.4a). Das elektrische Feld  $E$  ergibt sich aus dem Gradienten des elektrostatischen Potentials  $\Phi$ :

$$E = -\nabla\Phi . \quad (3.18)$$





(a) Schematischer Aufbau zur Messung des Seebeck-Koeffizienten. Eine Seebeck-Spannung  $U_S$  entsteht entlang eines Temperaturgradienten in einer Probe.

(b) Temperaturabhängige Kalibrierung des Seebeck-Koeffizients  $S_{Cu}$  der verwendeten Kupfer-Kabel, welche für die Kontaktierung von Messungen des Seebeck-Effekts verwendet werden.

**Abbildung 3.4:** Messaufbau und Kalibrierung für Messungen des Seebeck-Effekts.

Integriert man  $\mathbf{E}$  entlang des Weges zwischen  $A$  und  $B$ , so erhält man die Spannung zwischen diesen beiden Punkten:

$$\int_A^B \mathbf{E} d\mathbf{r} = - \int_A^B d\Phi = \Phi_A - \Phi_B = U_{AB} . \quad (3.19)$$

Die Kirchhoffsche Regel besagt, dass die Summe aller Spannungen in einem Stromkreis Null ergeben muss. Darum gilt:

$$0 = \sum_i U_i , \quad (3.20)$$

woraus folgt:

$$0 = U_S + \int \mathbf{E} d\mathbf{r} . \quad (3.21)$$

Das Integral lässt sich mithilfe der Definition der thermoelektrischen Spannung  $\mathbf{E} = S \cdot dT/d\mathbf{r}$  als Integration über die Temperatur schreiben:

$$U_S = - \int_{T_b}^{T_2} S_{Cu} dT - \int_{T_2}^{T_1} S_P dT - \int_{T_1}^{T_b} S_{Cu} dT . \quad (3.22)$$

Dabei ist  $T_b$  die Temperatur des Wärmebads,  $T_1$  die Temperatur des wärmeren Seebeck-Kontakts (näher am Heizer, oberer Kontakt in Abbildung 3.4a) und  $T_2$  die Temperatur des kälteren Seebeck-Kontakts (näher am Wärmebad, unterer Kontakt in Abbildung 3.4a). Führt man die Integrale unter der Näherung aus, dass sich die Seebeck-Koeffizient in diesen kleinen

Temperaturbereichen nicht ändern, erhält man schließlich:

$$U_S = -S_{Cu}(T_2 - T_1) - S_P(T_1 - T_2) . \quad (3.23)$$

Somit ergibt sich der gesuchte Seebeck-Koeffizient der Probe  $S_P$  für den Fall, dass der wärmere Seebeck-Kontakt mit dem *High*-Eingang des Voltmeters verbunden ist:

$$S_P = S_{Cu} - \frac{U_S}{T_1 - T_2} = S_{Cu} - \frac{U_S}{\Delta T} . \quad (3.24)$$

Für den Fall, dass der wärmere Seebeck-Kontakt mit dem *Low*-Eingang des Voltmeters verbunden ist, lässt sich analog herleiten:

$$S_P = S_{Cu} + \frac{U_S}{T_1 - T_2} = S_{Cu} + \frac{U_S}{\Delta T} . \quad (3.25)$$

Dabei muss jedoch beachtet werden, dass der Temperaturunterschied zwischen  $T_1$  und  $T_2$  nicht dem gemessenen Temperaturunterschied des Thermoelements entspricht. Mithilfe der Abstände der Thermoelement-Kontakte  $l$  sowie der Seebeck-Kontakte  $d_S$  lassen sich diese jedoch ineinander umrechnen, indem man den Temperaturgradienten in der Probe bestimmt und diesen mit dem Abstand der Seebeck-Kontakte multipliziert:

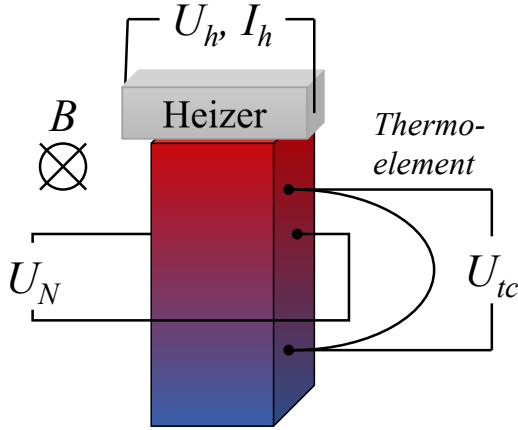
$$(\Delta T)_S = \nabla T \cdot d_S = (\Delta T)_{tc} \cdot \frac{d_S}{l} = \frac{U_{tc}}{S_{tc}} \cdot \frac{d_S}{l} . \quad (3.26)$$

#### 3.2.4 Nernst-Effekt

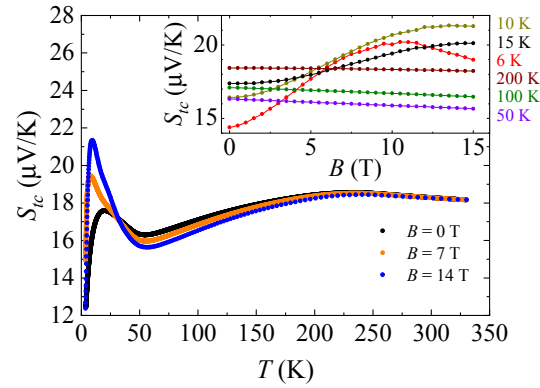
Um den Nernst-Effekt zu messen muss die entstehende Spannung in der Probe senkrecht zum angelegten Temperaturgradienten und zum externen Magnetfeld  $B$  detektiert werden. Der Aufbau ist schematisch in Abbildung 3.5a dargestellt. Die Spannung  $U_N$  erhält man analog zur Seebeck- und Thermoelementspannung aus der Differenz der Spannung bei ein- und ausgeschaltetem Heizer. Sind die Kontakte zur Messung von  $U_N$  nicht exakt senkrecht zum Temperaturgradienten platziert, wird zusätzlich eine Seebeck-Spannung entlang des Gradienten gemessen, welche die Messung verfälscht. Um diesem Fall vorzubeugen, wird, analog zum Hall-Effekt (Abschnitt 3.2.1), stets bei zwei Magnetfeldern  $B$  und  $-B$  gemessen. Durch die Umkehr des Magnetfeldes wechselt das Vorzeichen von  $U_N$ ,  $U_S$  bleibt jedoch konstant. Die Nernst-Spannung ergibt sich somit als:

$$U_N = \frac{U(B) - U(-B)}{2} = \frac{(U_N + U_S) - (-U_N + U_S)}{2} . \quad (3.27)$$

Ein zusätzlicher Einfluss des Seebeck-Koeffizienten der Kupfer-Drähte kann jedoch vernachlässigt werden, da dafür der Temperaturunterschied zwischen den Kontakten zu gering ist.



(a) Schematischer Aufbau zur Messung des Nernst-Effekts. Ein Heizer induziert einen Wärmestrom in einer Probe. Legt man senkrecht dazu ein Magnetfeld  $B$  an, so entsteht senkrecht zum Wärmestrom und zum Magnetfeld die Spannung  $U_N$ . Eine beispielhafte Nernst-Kontaktierung ist in Abbildung 3.6 dargestellt.



(b) Kalibrierung des Seebeck-Effekts des Thermoelements in Abhängigkeit der Temperatur für verschiedene konstante Magnetfelder. Im Inset sind die Abhängigkeiten vom Magnetfeld für ausgewählte konstante Temperaturen gezeigt.

**Abbildung 3.5:** Messaufbauten für thermoelektrische Transportmessungen.

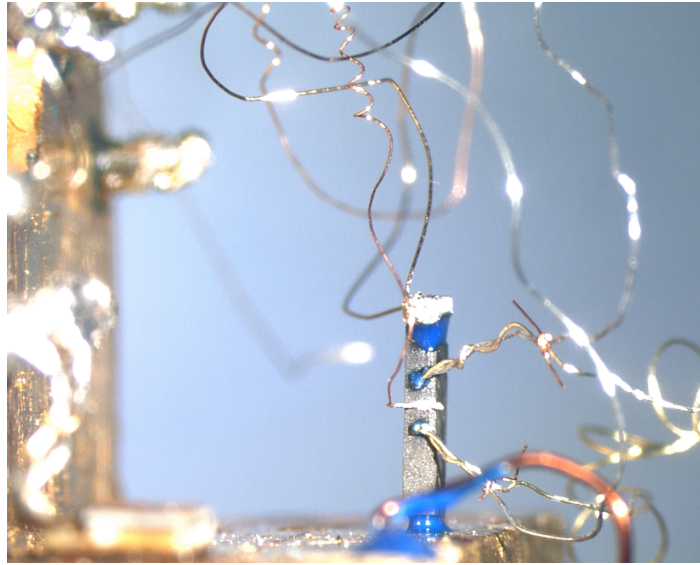
Schließlich kann das Nernst-Signal wie folgt bestimmt werden:

$$N(B, T) = S_{xy}(B, T) = \frac{E_x}{\nabla_y T} = \frac{U_N}{d_N} \cdot \frac{l}{\Delta T}, \quad (3.28)$$

wobei  $d_S$  der Abstand der Nernst-Kontakte senkrecht zum Temperaturgradienten ist. Um den Temperaturunterschied  $\Delta T$  zu bestimmen, muss jedoch beachtet werden, dass der Seebeck-Koeffizient des Thermoelements  $S_{tc}$  eine Abhängigkeit vom Magnetfeld besitzt. In Abbildung 3.5b ist dieser als Funktion der Temperatur für verschiedene konstante Magnetfelder dargestellt. Für hohe Temperaturen ist für endliche  $B$  kaum eine Änderung von  $S_{tc}$  sichtbar, jedoch zeigt sich bei tiefen Temperaturen eine deutliche Abhängigkeit vom Magnetfeld. Diese ist im Inset in Abbildung 3.5b für verschiedene konstante Temperaturen dargestellt. Während sich für 6 K, 10 K und 15 K starke Abhängigkeiten von  $B$  zeigen, nimmt diese ab 50 K deutlich ab und für 200 K ist  $S_{tc}$  bereits nahezu konstant.

### 3.3 Messunsicherheiten

Wie die Ergebnisse jeder Messung sind auch die in dieser Arbeit vorgestellten Daten mit Messfehlern behaftet. Die Messunsicherheiten der Stromquelle, welche zum Beispiel für die Messungen des elektrischen Widerstands verwendet wird, liegt bei  $\Delta I/I = 0,05 \%$  [76]. Alle



**Abbildung 3.6:** Fotografie einer Nernst-Kontaktierung an einer  $\text{Mn}_3\text{Ge}$ -Probe. Deutlich erkennbar sind die endlichen Ausdehnungen der Klebeflächen der Kontakte.

anderen Signale werden mithilfe von Voltmetern gemessen, für welche eine Unsicherheit von  $\Delta U/U = 0,01 \%$  angegeben wird [77].

Jede temperaturabhängige Messgröße wird zudem zusätzlich durch die Unsicherheit der Temperatur selbst beeinflusst. Misst man zum Beispiel den spezifischen Widerstand mit zwei verschiedenen Stromrichtungen (siehe Abschnitt 3.2.1), so dauert die Aufnahme eines Messpunktes  $\approx 4$  s. Bei einer Messung in Abhängigkeit der Temperatur kann diese mit bis zu 1 K/min variiert werden, wodurch sich pro Messpunkt eine Temperaturunsicherheit von 0,07 K ergibt. Zusätzlich wird für die Temperaturmessung des Lakeshore 340 Temperaturreglers eine Unsicherheit der Messung von  $\approx 0,008$  K bei 4 K und  $\approx 0,1$  K bei Raumtemperatur angegeben [78]. Bei der Messung von thermischen und thermoelektrischen Transportgrößen wird hingegen vor der Aufnahme jedes Messpunktes so lange gewartet, bis die Standardabweichung der der Temperatur über mindestens 30 s kleiner als  $\approx 10$  mK war.

Die mit Abstand größte Unsicherheit kommt jedoch durch geometrische Fehler zustande. So ist nicht immer garantiert, dass die Proben eine perfekte Quader-Form aufweisen. Auch die Klebeflächen der Kontakte haben eine endliche Größe von  $\approx 0,02$  mm (vgl. Abbildung 3.6), was umso schwerwiegender wird, desto kleiner die untersuchten Kristalle sind. So können typische geometrische Unsicherheiten in der Größenordnung von mehreren 10 % entstehen. Da diese jedoch systematisch sind, beeinflussen sie nicht die Temperaturabhängigkeit der Messgrößen, sondern lediglich deren Absolutwert.

# 4 Topologische Materialien

## 4.1 Weyl-Halbmatalle

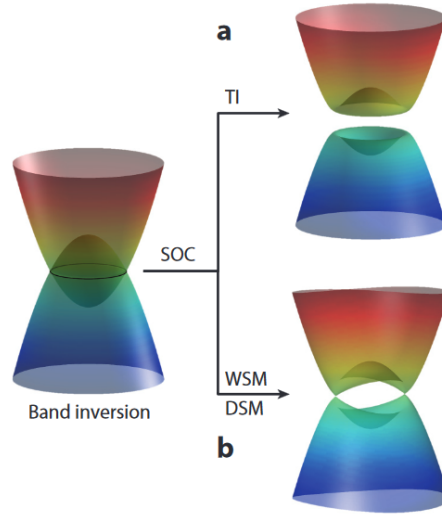
Als Paul Dirac 1928 [79] eine Gleichung zur relativistischen Beschreibung quantenmechanischer Elektronen vorstellte, legte er damit den Grundstein für die Quanten-Elektrodynamik und Quantenfeldtheorie [80]. Bereits ein Jahr danach präsentierte Hermann Weyl [81] die später nach ihm benannte Weyl-Gleichung als einen Spezialfall der Dirac-Gleichung mit verschwindender Fermionenmasse, welche sich wie folgt ausdrücken lässt:

$$i\partial_t\psi_{\pm} = \mathcal{H}_{\pm}\psi_{\pm}, \quad (4.1)$$

$$\mathcal{H}_{\pm} = \mp \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (4.2)$$

Hierbei beschreibt  $\boldsymbol{\sigma}$  den Vektor der drei Pauli-Spinmatritzen. Die durch die Gleichungen 4.1 und 4.2 beschriebenen sogenannten Weyl-Fermionen propagieren parallel oder antiparallel zu ihrem Spin und besitzen somit eine feste Chiralität. Lange waren Neutrinos die einzigen Kandidaten für solche exotischen Fermionen, was jedoch später mit der Messung einer endlichen Neutrinomasse ausgeschlossen wurde. Erst kürzlich konnten Weyl-Fermionen in Kristallen mit speziellen Eigenschaften der Bandstruktur nachgewiesen werden [4]. In Materialien mit einer Bandinversion kann durch die mit der Spin-Bahn-Kopplung einhergehenden Symmetriebrechung eine Bandlücke entstehen. Ist diese Bandlücke für alle  $k$ -Vektoren vorhanden, entsteht ein sogenannter topologischer Isolator (vgl. Abbildung 4.1), welcher in Folge dessen topologische Oberflächenzustände besitzt. Ist die Bandlücke nicht vollständig, sondern berühren sich die Bänder in einzelnen Punkten, spricht man von Dirac- oder Weyl-Halbmatalen.

In Dirac-Halbmatalen sind die an der Kreuzung beteiligten Bänder linear und doppelt entartet, wodurch an der Bandkreuzung selbst (am sogenannten Dirac-Punkt) ein vierfach entarteter Zustand vorliegt, welcher durch die Dirac-Gleichung beschrieben werden kann [82]. Deshalb wird von der Existenz von Dirac-Fermionen gesprochen, welche die Anregungen in einem kleinen Bereich um den Dirac-Punkt (Dirac-Kegel) darstellen. In Dirac-Halbmatalen ist die räumliche Inversionssymmetrie und die Zeitumkehrsymmetrie erhalten. Wird eine dieser beiden Symmetrien gebrochen, spaltet sich ein Dirac-Punkt in zwei Weyl-Punkte, welche jeweils doppelt entartet sind und chirale elementare Anregungen besitzen, die durch die Weyl-



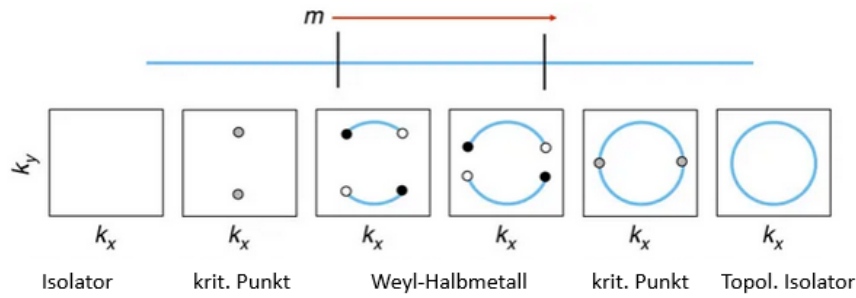
**Abbildung 4.1:** Schematische Bandstruktur eines bandinvertierten Materials aus Ref. [4]. Durch die Spin-Bahn-Kopplung öffnet sich eine Bandlücke welche entweder komplett ist (Fall **a**) oder an bestimmten Punkten im  $\mathbf{k}$ -Raum geschlossen bleibt (Fall **b**). Letztere Bandstruktur beschreibt ein Dirac- oder Weyl-Halbmatalle.

Gleichung (4.1 und 4.2) beschrieben werden können. Weyl-Punkte besitzen paarweise eine entgegengesetzte Chiralität und fungieren dabei als Quellen (positive Chiralität) und Senken (negative Chiralität) der Berry-Krümmung, welche aufgrund der Symmetriebrechung endlich sein kann (vgl. Abschnitt 2.2.2). Da die Berry-Krümmung an den Weyl-Punkten singulär wird, kann man diese auch als Analogon zu magnetischen Monopolen im  $\mathbf{k}$ -Raum verstehen.

Aus der Existenz von Weyl-Punkten in einem Kristall folgen eine Reihe physikalischer Phänomene, welche erste Ansatzpunkte bilden um die theoretisch vorhergesagten Weyl-Zustände experimentell zu überprüfen.

Liegt die Fermi-Energie  $E_F$  in der Nähe der Weyl-Punkte, kommt es zur Ausbildung mehrerer Fermi-Taschen, welche als voneinander getrennte Fermi-Flächen die Weyl-Punkte umschließen. Im Extremfall besteht die gesamte Fermi-Fläche nur aus Punkten, falls die Fermi-Energie genau auf dem Energieniveau der Weyl-Punkte liegt. Man kann Weyl-Halbmatalle als Systeme betrachten, welche sich am topologischen Phasenübergang zwischen einem topologischen (bandinvertierten) und einem normalen Isolator befinden (siehe oben). Im topologischen Isolator treten topologisch geschützte Oberflächenzustände auf. Wird die Bandlücke nun durch gebrochene Symmetrien an vereinzelten Punkten im  $\mathbf{k}$ -Raum geschlossen (Dirac-Punkt), ist der Oberflächenzustand immer noch topologisch geschützt und wird nur unterbrochen. Durch die Aufspaltung der Dirac-Punkte in jeweils zwei Weyl-Punkte werden die unterbrochenen Stücke des Oberflächenzustands voneinander separiert und bilden sogenannte Fermi-Bögen (vgl. Abbildung 4.2) [83].

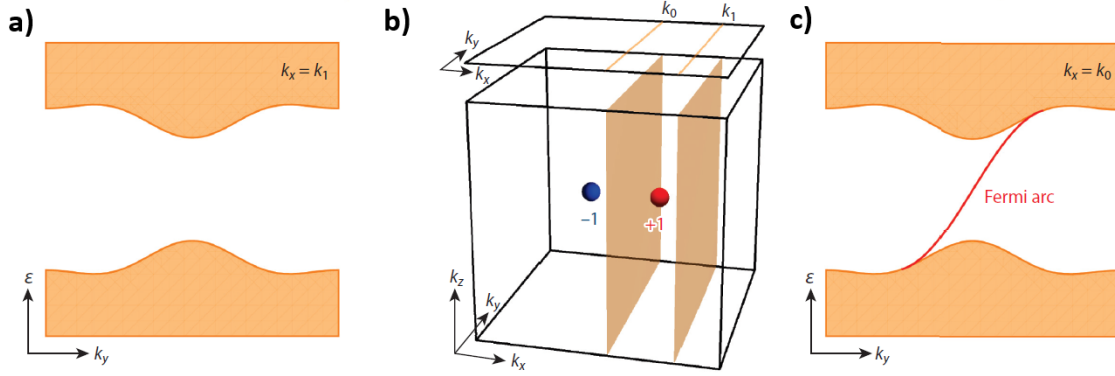
Alternativ kann das Auftreten von Fermi-Bögen mithilfe der Chern-Zahl erklärt werden. Die Chern-Zahl ist eine topologische Invariante und ergibt sich aus dem Flächen-Integral über die



**Abbildung 4.2:** Veränderung der Oberflächenzustände (hellblau) beim Übergang von einem normalen Isolator zu einem topologischen Isolator (hier in Abhängigkeit eines Parameters  $m$ ) aus Ref. [83]. Von rechts nach links gelesen, beim Übergang von einem topologischen Isolator zu einem Weyl-Halbmatalle, schließt sich die Bandlücke an Dirac-Punkten (graue Punkte). Durch Symmetriebrechung spalten sich beim Übergang zu einem Weyl-Halbmatalle die Dirac-Punkte in Weyl-Punkte (weiße und schwarze Punkte) auf.

Berry-Krümmung im Impulsraum. Integriert man über eine kleine geschlossene Fläche, welche einen Weyl-Punkt umgibt, repräsentiert die Chern-Zahl die chirale Ladung eines Weyl-Punktes von  $\pm 1$ , welche den Berry-Fluss durch die Fläche misst. Ein topologischer Oberflächenzustand in einem Schnitt der Oberflächen-Brillouin-Zone besteht nur, wenn in der entsprechenden, auf die Oberfläche projizierten Ebene der Gesamt-Brillouin-Zone eine Chern-Zahl ungleich Null besteht (aufgrund der Periodizität der Brillouin-Zone ist eine Ebene stets eine geschlossene zweidimensionale Fläche). Rastert man die Brillouin-Zone mit dieser Ebene ab (vgl. Abbildung 4.3), so ist die Chern-Zahl in selbiger zunächst Null, bis man auf einen Weyl-Punkt trifft. Beim Durchlaufen von diesem ändert sich die Chern-Zahl auf z.B.  $+1$  und bleibt konstant, bis ein weiterer Weyl-Punkt erreicht wird [84]. Besitzt dieser eine entgegengesetzte Chiralität, sinkt die Chern-Zahl beim Durchqueren wieder auf Null. Verallgemeinert ist die Chern-Zahl zwischen Weyl-Punkten unterschiedlicher Chiralität stets ungleich Null, weshalb in diesem Bereich ein Oberflächenzustand existiert. Jeder Fermi-Bogen verbindet somit die Projektion zweier Weyl-Punkte auf die Oberfläche miteinander. Zusammen mit linearen Bandkreuzungen können diese Oberflächenzustände demzufolge mithilfe von winkelaufgelöster Photoelektronenspektroskopie (ARPES) zu einer Identifizierung von Weyl-Halbmatalen benutzt werden [80].

Ein weiterer postulierter Effekt in Weyl-Halbmatalen ist das Auftreten einer chiralen Anomalie. Liegen ein externes Magnetfeld und ein elektrisches Feld parallel zur Verbindungslinie zweier Weyl-Punkte unterschiedlicher Chiralität an, entsteht durch die Verschiebung der Ladungsträger in Richtung der Felder ein Besetzungsunterschied der Elektronenzustände in den Weyl-Punkten. Dadurch ist die Anzahl von Ladungsträgern mit bestimmter Chiralität und somit die gesamte chirale Ladung nicht länger erhalten [85, 86]. Aufgrund dieser chiralen Anomalie ist die Rückstreuung der Ladungsträger stark unterdrückt und es entsteht ein zusätzlicher Term der elektrischen Leitfähigkeit, welcher proportional zu  $B^2$  anwächst [86]. Daraus folgt ein sich in Abhängigkeit des Magnetfeldes verringernder longitudinaler Widerstand, al-



**Abbildung 4.3:** Alternative Darstellung zur Entstehung von Fermi-Bögen an der Oberfläche von Weyl-Halbmatalen aus Ref. [84]. Die Brillouin-Zone wird in Scheiben entlang der  $k_x$ -Richtung zerlegt und anschließend auf die Oberfläche projiziert. **a)** Liegt der Schnitt im Bereich außerhalb der Weyl-Punkte, existiert in der Projektion eine Bandlücke. **b)** Lage der Schnitte innerhalb der Brillouin-Zone. Die Weyl-Punkte sind mit ihrer entsprechenden chiralen Ladung markiert. **c)** Befindet sich der Schnitt in einem Bereich zwischen den Weyl-Punkten, besteht in der Projektion aufgrund der endlichen Chern-Zahl eine Verbindung zwischen Valenz- und Leitungsband, welche dann als Oberflächenzustand sichtbar wird.

so ein negativer Magnetwiderstand. Dieser Effekt ist ein weiterer Indikator für die Präsenz von Weyl-Punkten und er sollte am größten sein, wenn das elektrische Feld und das Magnetfeld parallel sind und außerdem nicht von der Stromrichtung im Kristall abhängen. Obwohl ein negativer Magnetwiderstand bereits in Weyl-Halbmatal-Kandidaten nachgewiesen wurde [87–89], ist die Schlussfolgerung, dass es sich um ein Weyl-Halbmatal handelt, aus solchen Messungen nicht unbedacht zu ziehen [84]. Sobald noch zusätzliche, nicht-topologische Fermi-Taschen bestehen, kann ein negativer Magnetwiderstand in Multiband-Systemen auch ohne vorhandene Weyl-Punkte auftreten, zum Beispiel aufgrund einer feldabhängigen Anisotropie des Widerstandes [90]. Andererseits zeigen neuere theoretische Betrachtungen, dass auch in Weyl-Systemen ein positiver Magnetwiderstand auftreten kann. Die Berücksichtigung des orbitalen magnetischen Moments in Boltzmann-Transportrechnungen führt zu einem solchem Verhalten, falls die Streuraten zwischen den Weyl-Kegeln und innerhalb der Weyl-Kegel gleich sind [91]. Das Auftreten bzw. Ausbleiben eines negativen Magnetwiderstandes ist somit kein eindeutiger Hinweis auf das Vorhandensein von Weyl-Punkten in einem Material.

Auch wenn die entsprechenden Detektoren in den letzten Jahren weiter verfeinert wurden und Nachteile immer besser ausgleichen können [92], so ist auch der Nachweis von Fermi-Bögen mittels ARPES zur Identifizierung von Weyl-Halbmatalen nicht immer eindeutig, da für solche Messungen grundlegend eine hohe Anzahl von Ladungsträgern am Fermi-Niveau benötigt und keine störenden Felder die Messungen beeinträchtigen dürfen. Letzteres kann zum Beispiel bei der Untersuchung potenzieller Weyl-Halbmatalle mit gebrochener Zeitumkehr-Symmetrie der Fall sein. Aufgrund der magnetischen Ordnung können Streufelder die Photoelektronen ablenken.

Aufgrund dieser Einschränkungen für die Identifikation von Weyl-Halbmatalen mittels Fer-



mi-Bögen oder eines negativen Magnetwiderstands ist eine zusätzliche Nachweismethode sehr nützlich. Insbesondere ein direkter Zugang zur Berry-Krümmung, welche den Kern der Weyl-Physik bildet, ist noch nicht etabliert. Da sich die Berry-Krümmung direkt auf transversale Transportkoeffizienten auswirkt (vgl. Kapitel 2.2), sind anomale transversale Transportphänomene, also der anomale Hall- und der anomale Nernst-Effekt, vielversprechende Kandidaten für zusätzliche Nachweismethoden von Weyl-Halbmatalen [70, 93–96]. Im Folgenden werden deshalb transversale thermoelektrische Transportmessungen an Weyl-Halbmatal-Kandidaten mit gebrochener Inversionssymmetrie (Abschnitt 4.2) und mit gebrochener Zeitumkehr-Symmetrie (Abschnitt 4.3) untersucht.

## 4.2 TaAs und TaP: Weyl-Halbmetail-Kandidaten mit gebrochener Inversionssymmetrie

Nach langer Suche nach geeigneten Kandidaten für die Realisierung von Weyl-Halbmetailen wurde 2014 TaAs als Resultat von *ab initio*-Kalkulationen vorgeschlagen [83, 97]. Das Übergangsmetail-Monoarsenid TaAs besitzt eine intrinsisch gebrochene Inversionssymmetrie des Kristallgitters. Diese Kristallstruktur ist exemplarisch in Abbildung 4.4a dargestellt. Bereits 2015 konnten mithilfe von ARPES-Messungen topologische Fermi-Bögen [98, 99] und lineare Bandkreuzungen nachgewiesen werden (vgl. Abbildung 4.4b). Bald darauf folgten Untersuchungen in den verwandten Materialien NbAs [100], TaP [101] und NbP [102].

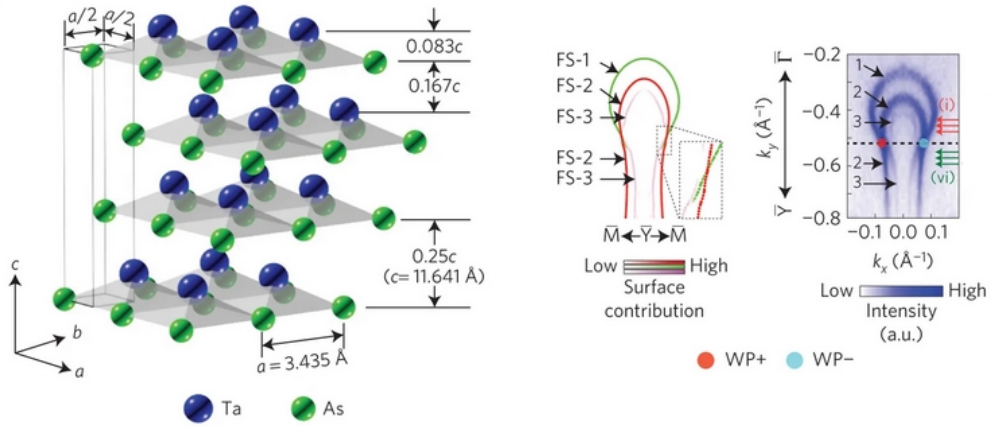
Bandstrukturechnungen sagen für TaAs [104] und TaP [105] jeweils 24 Weyl-Punkte voraus, welche sich durch Symmetrioperationen aus zwei verschiedenen Weyl-Punkte-Paaren W1 und W2 ergeben. Die beiden Fermi-Flächen und Positionen der Weyl-Punkte in der Brillouin-Zone sind für beide Materialien in Abbildung 4.5 dargestellt. In beiden Fällen sind sowohl Elektronen- als auch Loch-Taschen entlang geschlossener Knotenlinien angeordnet. In TaAs befindet sich die Fermi-Energie knapp oberhalb von W1 und W2, weshalb sich die Weyl-Punkte W2 jeweils einzeln in kleinen Elektronen-Taschen befinden, während für W1 beide Punkte unterschiedlicher Chiralität innerhalb einer größeren Bananen-förmigen Elektronen-Tasche liegen (vgl. Abbildung 4.5b). Zusätzlich existieren weitere Bananen-förmige Loch-Taschen entlang der Knotenlinien.

Im Gegensatz dazu gibt es in TaP nur zwei verschiedene Arten von Fermi-Taschen. Eine Elektronen-Tasche beinhaltet jeweils ein Paar von W1-Punkten, während sich jeweils zwei Paare von W2-Paaren in Loch-Taschen befinden. Die W2-Punkte-Paare liegen energetisch somit oberhalb des Fermi-Niveaus, während die W1-Punkte-Paare wie in TaAs darunter liegen.

### 4.2.1 Anomaler Nernst-Effekt in TaAs und TaP

Die in diesem Abschnitt dargelegten Messungen an TaAs und TaP sowie deren Auswertung wurden in Zusammenarbeit mit und federführend von Federico Caglieris durchgeführt, während theoretische Interpretationen von Steffen Sykora stammen. Die Ergebnisse wurden in Referenz [106] veröffentlicht.

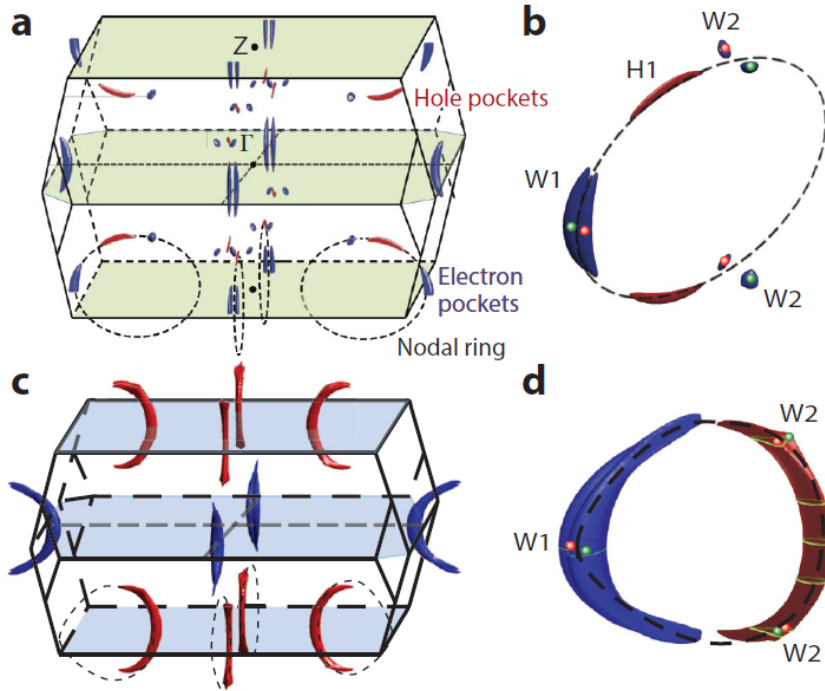
Abbildung 4.6a zeigt die Messungen des Nernst-Signals geteilt durch die Temperatur  $S_{xy}/T$  in TaP in Abhängigkeit des Magnetfeldes zwischen 0 und 14 T für ausgewählte Temperaturen.  $S_{xy}/T$  zeigt hierbei für alle Temperaturen einen sehr großen Absolutwert von bis zu  $S_{xy}/T \approx 4 \mu\text{VK}^{-2}$  bei 30 K. Für  $T = 20, 30$  und 50 K bildet sich nach einem anfänglichen Anstieg ab einem Sättigungsfeld  $B_S \approx 4$  T ein weit ausgedehntes Plateau, welches von Quantenoszillationen überlagert wird. Ein solches Verhalten stellt eine starke Abweichung von der normalen Abhängigkeit des Nernst-Signals vom Magnetfeld dar (vgl. Abschnitt 2.1.4). Es



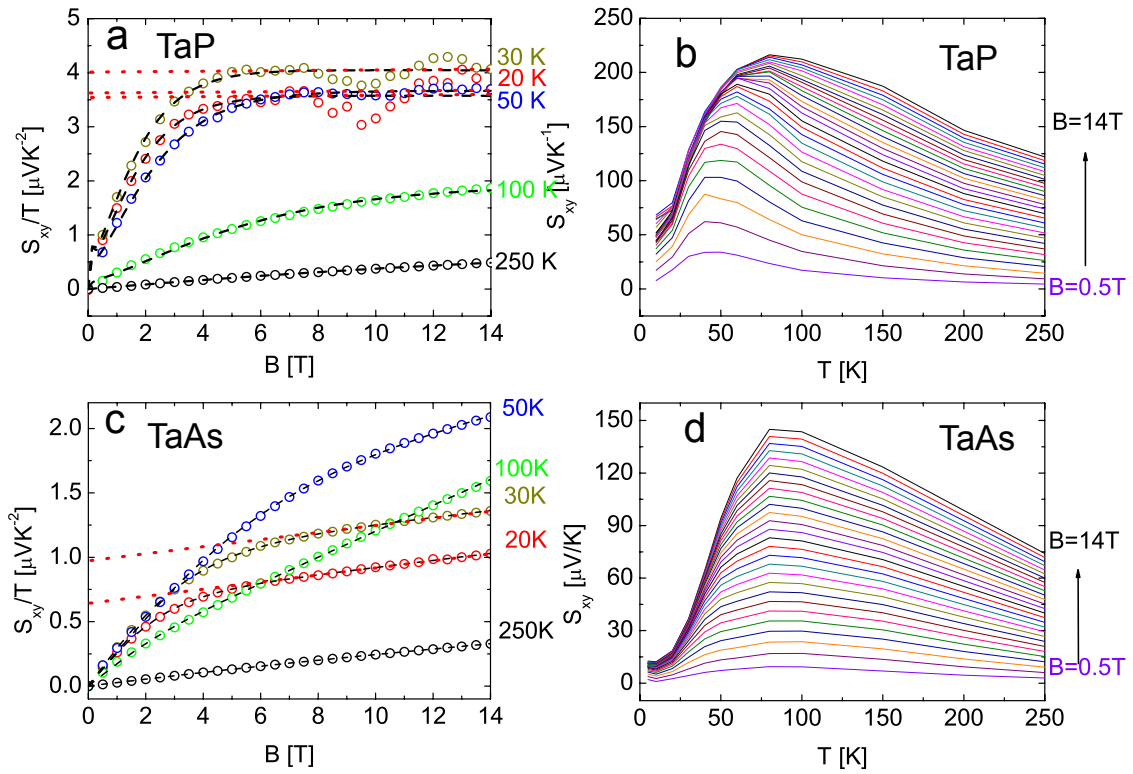
(a) Kristallstruktur (Raumgruppe  $I4_1md$ ) von TaAs.

(b) Bandstrukturrechnungen und ARPES Messungen zeigen eindeutig Fermi Bögen in TaAs.

**Abbildung 4.4:** Kristallstruktur und Oberflächenzustände in TaAs aus Ref. [103].



**Abbildung 4.5:** Darstellung der Fermi-Flächen von TaAs und TaP aus Ref. [4, 104, 105]. (a) Fermi-Fläche von TaAs mit verschiedenen Elektronen- und Loch-Taschen, welche entlang von Knoten-Linien angeordnet sind („Nodal ring“). (b) Lage der Weyl-Punkte-Paare W1 und W2 innerhalb der jeweiligen Fermi-Taschen in TaAs. (c) Fermi-Fläche von TaP mit Bananen-förmigen Elektronen- und Loch-Taschen, welche jeweils paarweise entlang geschlossener Knoten-Linien vorkommen. (d) Lage der Weyl-Punkte-Paare W1 und W2 innerhalb der jeweiligen Fermi-Taschen in TaP.



**Abbildung 4.6:** Nernst-Signal in TaP ((a) und (b)) und TaAs ((c) und (d)) aus Ref. [106]. (a) und (c) zeigen  $S_{xy}/T$  in Abhängigkeit des Magnetfeldes. Die rot gestrichelten Linien sollen den Verlauf bei hohen Feldern verdeutlichen. Die schwarz-gestrichelten Linien repräsentieren die Datenanpassung mittels des verwendeten phänomenologischen Modells. (b) und (d) zeigen das Nernst-Signal  $S_{xy}$  in Abhängigkeit der Temperatur.

scheint in diesem Feldbereich ein anomaler Beitrag des Nernst-Effektes vorzuherrschen, welcher unabhängig vom Magnetfeld ist. Diese anomale Komponente dominiert das Nernst-Signal bis  $T = 50$  K. Für  $T = 100$  K ist zwar noch immer eine Tendenz zur Sättigung zu erkennen, jedoch tritt diese bis zum verwendeten maximalen Magnetfeld ( $B = 14$  T) nicht auf. Erwärmt man das System noch weiter, wird das Nernst-Signal bei  $T = 250$  K fast ausschließlich durch ein lineares Verhalten bestimmt. In der Temperaturabhängigkeit von  $S_{xy}$  (vgl. Abbildung 4.6b) zeigt sich ein breites Maximum bei 80 – 100 K und hohen Magnetfeldern, welches mit sinkendem Feld zu niedrigeren Temperaturen wandert. Dieser Bereich markiert genau den zuvor erwähnten Regime-Wechsel von einem anomal zu einem normal dominierten Verhalten des Nernst-Signals.

Messungen von  $S_{xy}/T$  wurden ebenfalls in TaAs durchgeführt und sind in Abhängigkeit des Magnetfeldes in Abbildung 4.6c dargestellt. Im Gegensatz zu TaP erreicht  $S_{xy}/T$  in TaAs für Temperaturen im Bereich bis 50 K kein konstantes Plateau. Eine Tendenz zur Sättigung ist zwar erkennbar, ähnlich der Daten für  $T = 100$  K in TaP, jedoch bildet sich für hohe Magnetfelder eine lineare Abhängigkeit aus. Dieser normale Beitrag wird bereits für Temperaturen von  $T = 100$  K dominant. Bei  $T = 250$  K ist schließlich nur noch ein normales Verhalten

sichtbar. Die Temperaturabhängigkeit von  $S_{xy}$  in TaAs für verschiedene Magnetfelder ist in Abbildung 4.6d dargestellt. Die Temperaturverläufe ähneln denen der Daten in TaP, jedoch befindet sich hier das Maximum im Bereich 75 – 100 K und bleibt für alle Magnetfelder nahezu konstant.

#### 4.2.2 Auswertung

Um eine qualitative Analyse des Nernst-Signals in TaP und TaAs durchzuführen, wurde folgendes Modell zur Anpassung der feldabhängigen Daten aus Ref. [107] verwendet:

$$S_{xy} = S_{xy}^N + S_{xy}^A, \quad (4.3)$$

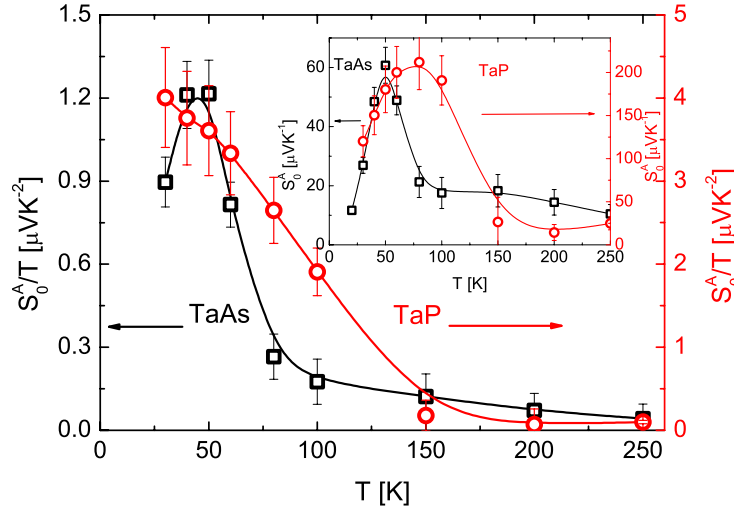
$$S_{xy}^N = S_0^N \frac{\mu_e B}{1 + (\mu_e B)^2}, \quad (4.4)$$

$$S_{xy}^A = S_0^A \tanh\left(\frac{B}{B_S}\right). \quad (4.5)$$

Hierbei ist  $\mu_e$  die mittlere Mobilität und  $B_S$  das Sättigungsfeld.  $S_0^N$  und  $S_0^A$  beschreiben die Amplituden der normalen und anomalen Beiträge. Der normale Beitrag zum Nernst-Signal in Gleichung 4.4 weist die aus der Boltzmann-Theorie erhaltene Feldabhängigkeit auf (vgl. Abschnitt 2.1.1). Gleichung 4.5 beschreibt die anomale Sättigung des Nernst-Signals.

Die Anpassungen der feldabhängigen Daten sind in Abbildung 4.6a für TaP und in Abbildung 4.6c für TaAs als schwarze gestrichelte Linien dargestellt. Aus dem Modell lässt sich somit die Temperaturabhängigkeit von  $S_0^A/T$  ermitteln, welche in Abbildung 4.7 gezeigt wird.  $S_0^A/T$  zeigt für beide Materialien einen steilen Abfall von ungefähr einer Größenordnung, was ein Indiz für einen Übergang zwischen einem Niedrigtemperatur- und einem Hochtemperaturbereich darstellt. Im Niedrigtemperaturbereich ist der anomale Beitrag zum Nernst-Signal stark, während er im Hochtemperaturbereich nur schwach oder gar nicht ausgeprägt ist. Dieser Übergang befindet sich mit steigender Temperatur in TaP bei ungefähr 150 K und in TaAs bei 100 K. Er liegt dabei im gleichen Temperaturbereich, in welchem sich die Hall-Leitfähigkeit in beiden Materialien stark ändert [108–110]. Die dadurch resultierende hohe Hall-Mobilität bei niedrigen Temperaturen wurde auf unterdrückte Rückstreu-Prozesse von Weyl-Fermionen zurückgeführt [108–110].

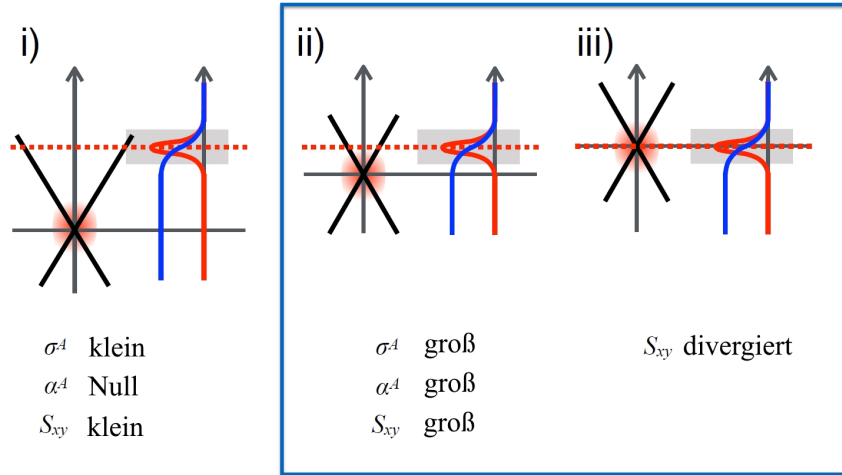
Sind Weyl-Punkte in einem Material vorhanden, so hängt der Temperaturverlauf des anomalen Nernst-Signals stark vom Abstand der Weyl-Punkte zum chemischen Potenzial  $\mu$  ab. Im Folgenden wird  $\mu$ , je nach Bezugspunkt, auch als Weyl-Punkt-Energie (dabei wird das chemische Potential Null gesetzt) oder als chemisches Potenzial (dabei wird die Weyl-Punkt Energie Null gesetzt) bezeichnet. Abbildung 4.8 zeigt eine Veranschaulichung der Faltungsinintegrale aus den Gleichungen 4.13 und 4.14 in der Nähe eines Weyl-Punktes. Je kleiner  $\mu$ , desto größer werden die anomalen Beiträge zu  $\sigma_{xy}$  und  $\alpha_{xy}$  und somit auch  $S_{xy}$ . Die grau schat-



**Abbildung 4.7:** Temperaturabhängigkeit des Anpassungsparameters  $S_0^A/T$  und  $S_0^A$  (Inset) für TaAs (schwarz) und TaP (rot) aus Ref. [106]. Für beide Materialien ist ein Übergangsbereich bei 150 K (TaP) und 100 K (TaAs) eindeutig zu erkennen.

tierte Fläche beschreibt die thermische Verbreiterung  $k_B T$  des Fermi-Niveaus. Nur wenn sich der thermische Energiebereich und die erhöhte Berry-Krümmung energetisch überlappen, also wenn gilt  $\mu \approx k_B T$ , kann eine Temperaturabhängigkeit des anomalen Nernst-Signals sichtbar sein. Wenn  $k_B T \ll |\mu|$  tragen nur Zustände mit einer Energie  $|\epsilon| < |\mu|$  zum anomalen Nernst-Signal bei. Mit steigender Temperatur steigt dieser Beitrag an, bis die thermische Energie  $|\mu|$  erreicht. Sobald  $k_B T$  größer als  $|\mu|$  wird, heben sich die Beiträge der auf dem Weyl-Kegel gegenüberliegenden Zustände gegenseitig auf, was zu einem Abfall des Nernst-Signals führt.

In einem Weyl-Halbmethyl kann es durch Änderung des Magnetfeldes zu einer Verschiebung des chemischen Potenzials kommen, was anhand von Abbildung 4.9 verdeutlicht wird. Legt man ein äußeres Magnetfeld an ein Dirac-Halbmethyl an, so kommt es zu einer Aufspaltung von Dirac-Punkten in Weyl-Punkte (vgl. Abbildung 4.9b). Aufgrund der Existenz der Weyl-Punkte tritt ein endliches anomales Nernst-Signal auf. Mit steigendem Magnetfeld erhöht sich auch der Abstand der Weyl-Punkte im  $\mathbf{k}$ -Raum, wodurch zwischen den Weyl-Punkten Zustände niedriger Energie entstehen. Aufgrund der Erhaltung der Ladungsträgerzahl führt dieser Prozess zu einer Verringerung des chemischen Potenzials, welches sich infolgedessen den Weyl-Punkten annähert, wodurch das anomale Nernst-Signal zunimmt. Kreuzt  $\mu$  den oberen Sattelpunkt der Weyl-Punkte, kommt es zu einer Aufteilung der zugehörigen Fermi-Fläche in zwei Fermi-Taschen, welche jeweils einen Weyl-Punkt umschließen, wodurch sich die Topologie der Fermi-Fläche ändert (vgl. 4.9c). Eine weitere Erhöhung des Magnetfeldes wird das chemische Potenzial weiter absenken, bis es in einem Bereich liegt, in dem die geschnittenen Weyl-Bänder als linear betrachtet werden können (vgl. 4.9d), wodurch eine fortführende Separation der Weyl-Punkte die Dispersion an der Fermi-Fläche nicht mehr signifikant ändert.



**Abbildung 4.8:** Schematische Darstellung der Faltung der energieabhängigen Fermi-Verteilung (blau) und der Entropiedichte (rot) mit der Berry-Krümmung (rote Fläche) in der Nähe eines Weyl-Punkts aus Ref. [106]. Der thermische Energiebereich ist durch die graue Fläche angedeutet. Im Fall einer Überlappung des grauen und roten Bereichs ( $\mu \approx k_B T$ ) ist der anomale Nernst-Effekt groß und sensitiv auf eine Änderung des chemischen Potentials (siehe (ii) und (iii)).

Dadurch bleibt das chemische Potenzial und somit das Nernst-Signal für weitere Magnetfeld-erhöhungen konstant.

Die Magnetfeldabhängigkeit des Nernst-Signals wird durch diese Argumentation qualitativ erklärt. Nach einem anfänglichen Anstieg kommt es oberhalb von  $B_S$  zu einer Sättigung von  $S_{xy}$  (vgl. Abbildung 4.9e). Um einen quantitativen Vergleich mit den experimentellen Daten zu ermöglichen, kann das Sättigungsfeld  $B_S$  abgeschätzt werden. Mithilfe eines minimalen Modells der Bandstruktur [93] in der Nähe von zwei Weyl-Punkten,

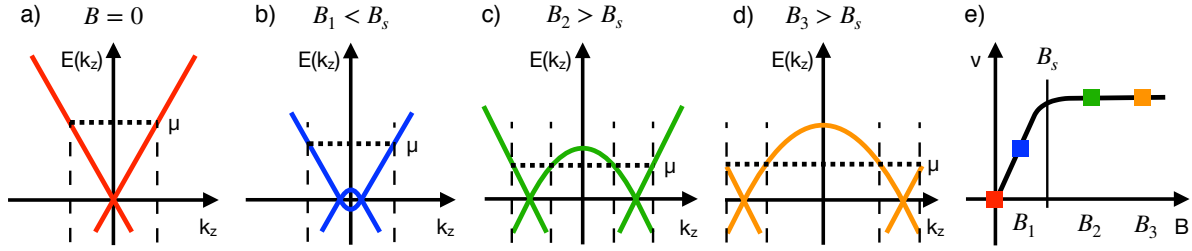
$$E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{v_F^2(k_x^2 + k_y^2) + (gB \pm v_F k_z)^2}, \quad (4.6)$$

lässt sich  $\mu$  als Funktion von  $B$  bestimmen. Hierbei liegt  $B$  in  $z$ -Richtung an,  $g$  ist der Landé-Faktor und  $v_F$  ist die Fermi-Geschwindigkeit. Das Fermi-Volumen  $\Delta V$  in Abhängigkeit von  $\mu$  und  $B$  kann mithilfe des Integrals

$$\Delta V = \int d^3k f_{\mathbf{k}}(\mu, B) \quad (4.7)$$

ausgedrückt werden. Durch eine numerische Lösung von Gleichung 4.7 erhält man eine Abhängigkeit zwischen  $\mu$  und  $B$ , welche oberhalb von  $B_S$  saturiert. Das so ermittelte Sättigungsfeld lässt sich ausdrücken als [106]:

$$B_S = v_F \frac{m_e}{e} \sqrt[3]{\frac{3\Delta V}{2\pi}} \cdot 0,745. \quad (4.8)$$



**Abbildung 4.9:** Verhalten des chemischen Potentials  $\mu$  in einem Dirac- bzw. Weyl-Halbmetail in Abhängigkeit des Magnetfeldes aus Ref. [106]. **a)** Für  $B = 0$  befindet sich ein Dirac-Kegel bei  $k_z = 0$ . **b)** Ein endliches Magnetfeld  $B$  entlang der  $z$ -Richtung führt zu einer Aufspaltung des Dirac-Kegels in zwei Weyl-Kegel, deren Abstandsänderung im  $\mathbf{k}$ -Raum proportional zu  $B$  ist. Um Die Zahl der Ladungsträger zu erhalten, muss sich das chemische Potenzial  $\mu$  (schwarze gestrichelte Linie) absenken. **c)** Das chemische Potenzial ist so weit abgesunken, dass es für  $B > B_s$  zu einem Lifshitz-Übergang kommt, bei dem sich die Topologie der Fermi-Fläche in der Nähe der Weyl-Punkte ändert. **d)** Mit einer weiteren Erhöhung des Magnetfeldes nimmt der Abstand der Weyl-Punkte weiter zu, jedoch ohne das Volumen im  $\mathbf{k}$ -Raum (Fläche zwischen den gestrichelten Linien) zu ändern. Deshalb sinkt  $\mu$  nicht weiter ab. **e)** Der aus der Änderung von  $\mu$  resultierende Verlauf des Nernst-Signals  $S_{xy}$  in Abhängigkeit des Magnetfeldes. Die farbigen Markierungen repräsentieren die jeweiligen Fälle **a)** - **d)**.

$m_e$  und  $e$  sind die Elektronenmasse und -ladung, die Zahl 0,745 entspricht dem Verhältnis des chemischen Potentials nach der Sättigung  $\mu_s$  und vor dem Anlegen des Magnetfeldes  $\tilde{\mu}$ ,  $\mu_s/\tilde{\mu} = 0,745$ . Hierbei sind sowohl  $\tilde{\mu}$  als auch  $\mu_s$  von der Energie der Weyl-Punkte abhängig und somit spezifisch für jedes Material. Für TaP und TaAs sollte das Verhältnis der beiden Größen jedoch ähnlich sein. Bandstrukturechnungen sagen für beide Verbindungen die Existenz von Weyl-Punkten voraus, welche entlang der  $k_x$ -Richtung um  $\Delta k_x$  in der Größenordnung von  $10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$  separiert sind [111]. Das im Experiment verwendete Magnetfeld wurde entlang der  $k_z$ -Richtung angelegt und induziert somit eine Änderung des Abstandes der Weyl-Punkte in dieser Richtung um  $\Delta k_z = 2gB/v_F$ , welche für  $B = 10 \text{ T}$  ungefähr  $4 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$  beträgt.

Um den Sättigungseffekt in Abhängigkeit des Magnetfeldes zu erhalten, muss mindestens ein Weyl-Punkte-Paar nahe der Fermi-Energie gemeinsam von einer Fermi-Tasche umschlossen sein. Wie in Abschnitt 4.2 dargelegt, liegt in TaP laut Bandstrukturechnungen das Weyl-Punkte-Paar W1 innerhalb einer Fermi-Fläche (siehe Abbildung 4.5b) [4, 104, 111]. Der Sattelpunkt zwischen den Weyl-Punkten W1 wird in [111] mit einer Energie von ungefähr 0,015 eV unterhalb der Fermi-Energie angegeben, wobei das chemische Potenzial im Nullfeld  $\tilde{\mu} \approx -0.05 \text{ eV}$  ist. Man kann somit für  $\mu_s/\mu$  einen Wert von 0,751 schlussfolgern und mithilfe von  $\Delta V \approx 10^{-9} \text{ \AA}^{-3}$  und  $v_F \approx 10^5 \text{ m/s}$  aus Ref. [111] im Rahmen von Gleichung 4.8 ein Sättigungsfeld von  $B_s = 3,3 \text{ T}$  abschätzen. Für TaAs ergeben Bandstrukturechnungen getrennte Fermi-Flächen um die jeweiligen Weyl-Punkte von W1 und W2 (siehe Abbildung 4.5a) [4, 105, 111], jedoch ist auch in diesem Fall in den Nernst-Messungen ein anomales Verhalten sichtbar. Der theoretisch vorhergesagte Abstand des Sattelpunktes zur Fermi-Energie liegt bei



0,01 eV [111], eine genaue Erfassung solch kleiner Energiewerte benötigt jedoch Bandstrukturrechnungen mit einer sehr hohen  $\mathbf{k}$ -Punktdichte. Die Nernst-Messungen legen deshalb nahe, dass eine genauere Untersuchung der Bandstruktur für geringe Energien eine Korrektur der Sattelpunktenergie unterhalb der Fermi-Energie ergeben würde.

Ferner kann man anhand des temperaturabhängigen anomalen Nernst-Signals eine Aussage über die Lage der Weyl-Punkte in Bezug auf die Fermi-Fläche treffen. Im Inset in Abbildung 4.7 ist  $S_0^A$  für TaP und TaAs in Abhängigkeit der Temperatur dargestellt. Für TaP liegt das Maximum bei  $T \approx 100$  K, während  $S_0^A$  in TaAs bei  $T \approx 50$  K maximal wird. Somit sollte der Energieabstand des energetisch am nächsten zur Fermi-Energie liegenden Weyl-Punkte-Paars in TaP ungefähr doppelt so groß sein wie in TaAs, was in der Tat durch Bandstrukturrechnungen in [111] bestätigt wird.

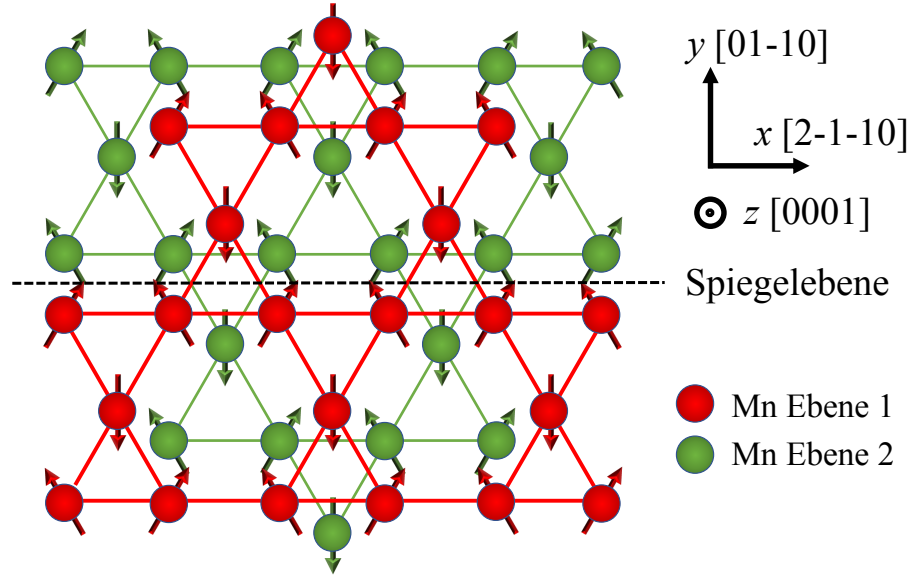
## Fazit

In TaAs und TaP kann der Nernst-Effekt genutzt werden, um grundlegende Aussagen über die Lage des chemischen Potentials relativ zu den Weyl-Punkten zu treffen. Das anomale Verhalten des Nernst-Signals in Abhängigkeit des Magnetfeldes deutet dabei auf Weyl-Punkte nahe der Fermi-Fläche in beiden Materialien hin. In Abhängigkeit des Magnetfeldes kommt es aufgrund der Geometrie der Bandstruktur in der Nähe der Weyl-Punkte zu einer Verschiebung des chemischen Potentials und somit zu einem Lifshitz-Übergang der Fermi-Fläche. Zusätzlich kann der Abstand der Weyl-Punkte zur Fermi-Fläche aus der Temperaturabhängigkeit des Nernst-Signals abgeschätzt werden. All diese Ergebnisse bestätigen vorhandene Bandstrukturrechnungen und zeigen, dass der Nernst-Effekt eine extrem sensitive Sonde für die Detektion von Weyl-Halbmatalen ist.

## 4.3 Mn<sub>3</sub>Ge: Weyl-Halbmetail-Kandidat mit gebrochener Zeitumkehrsymmetrie

Aufgrund ungewöhnlich großer gemessener anomaler Transportkoeffizienten riefen die nicht-kollinearen Antiferromagneten Mn<sub>3</sub>Ge und Mn<sub>3</sub>Sn kürzlich ein erhebliches Interesse hervor [113–120]. Hall- [114] und Nernst-Effekt [116, 117] in Mn<sub>3</sub>Sn wurden bereits gründlich untersucht, jedoch besitzt Mn<sub>3</sub>Sn unterhalb von  $T = 50$  K keine langreichweitige magnetische Ordnung, sondern einen glasartigen ferromagnetischen Grundzustand [121, 122], in dem sowohl der anomale Nernst- als auch der anomale Hall-Effekt verschwinden [117]. Im Gegensatz dazu bestehen magnetische Ordnung und anomaler Transport im isostrukturellen Mn<sub>3</sub>Ge bis hin zu tiefen Temperaturen. Mn<sub>3</sub>Ge kristallisiert unter anderem in einer hexagonalen Struktur (Raumgruppe  $P6_3/mmc$ ), wobei Mn-Atome ein Kagome-Gitter bestehend aus Dreiecken und Hexagonen formen und sich Ge-Atome im Zentrum der Hexagone befinden. Im nicht-kollinearen antiferromagnetischen Grundzustand von Mn<sub>3</sub>Ge ( $T_N \approx 365$  bis  $400$  K [123–126]) sind die magnetischen Momente der Mn-Atome in einem Winkel von jeweils  $120^\circ$  zueinander verdreht [127] (vgl. Abbildung 4.10). Dieser magnetische Grundzustand lässt sich auf eine Kombination von Heisenberg- und Dzyaloshinskii-Moriya-Wechselwirkung zurückführen [128]. Nur ein sehr kleines magnetisches Moment (rund  $0.02 \mu_B$ ) bildet sich aufgrund einer leichten Verkippung der Mn-Momente in der Ebene [124, 129], welches als das magnetische Moment von Oktupol-Gruppen von Mn-Atomen interpretiert wird [130].

Bandstrukturechnungen sagen außerdem zahlreiche Weyl-Punkte nahe der Fermi-Fläche in Mn<sub>3</sub>Ge voraus [127]. In Abbildung 4.11 sind die in Ref. [127] errechneten Bandstrukturen von Mn<sub>3</sub>Sn und Mn<sub>3</sub>Ge dargestellt. Es ist deutlich sichtbar, dass in beiden Materialien Weyl-Punkte für einen Abstand von weniger als  $100$  meV vom Fermi-Niveau entfernt vorhergesagt werden. Die entsprechenden  $\mathbf{k}$ -Raum-Koordinaten der einzelnen in Ref. [127] vorhergesagten Weyl-Punkte in Mn<sub>3</sub>Ge sind in Tabelle 4.1 zusammen mit ihrer Chiralität und Energie aufgelistet. Dabei sind  $k_x$ ,  $k_y$  und  $k_z$  in Einheiten von  $\pi$  angegeben. Außerdem ist zu beachten, dass jeder Eintrag mehrere Weyl-Punkte beschreibt.  $W_{1,2,7}$  beschreiben jeweils vier Kopien bei  $(\pm k_x, \pm k_y, k_z = 0)$ .  $W_4$  beschreibt vier Kopien bei  $(k_x \approx 0, \pm k_y, \pm k_z)$  und  $W_9$  zwei Kopien bei  $(k_x \approx 0, \pm k_y, k_z = 0)$ . Die übrigen Einträge stehen für jeweils vier Kopien bei  $(\pm k_x, \pm k_y, \pm k_z)$ , Kombinationen der Vorzeichen entsprechend der Symmetrien, siehe unten) [127]. Diese zahlreichen Weyl-Punkte werden aufgrund der besonderen Symmetrien des Systems erzeugt. Wie bereits oben erwähnt, wird der Grundzustand von Mn<sub>3</sub>Ge (und der Zustand von Mn<sub>3</sub>Sn oberhalb von  $T = 50$  K) durch einen nicht-kollinearen antiferromagnetischen Spinzustand beschrieben (vgl. Abbildung 4.10). Zwei übereinander liegende Ebenen können dabei mithilfe einer Spiegelsymmetrie ( $M_y$ ) zusammen mit einer Verschiebung um  $c/2$  entlang der  $z$ -Richtung ineinander überführt werden. Zusätzlich bestehen kombinierte Spiegel- und Zeitumkehrsymmetrien  $M_x T$  und  $M_z T$  [127]. Mithilfe dieser drei Symmetrieoperationen lassen sich somit die



**Abbildung 4.10:** Mn-Atome und magnetische Struktur von Mn<sub>3</sub>Ge aus Ref. [112]. Die Ge-Atome befinden sich im Zentrum der Hexagone und sind hier nicht gezeigt. Durch eine Spiegelung an der  $xz$ -Spiegelebene (schwarz gestrichelt) und eine Verschiebung von  $c/2$  entlang der  $z$ -Richtung können zwei benachbarte Ebenen ineinander überführt werden.

verschiedenen Koordinaten der Weyl-Punkt-Kopien bestimmen und außerdem Aussagen über die Komponenten der Berry-Krümmung herleiten [127]:

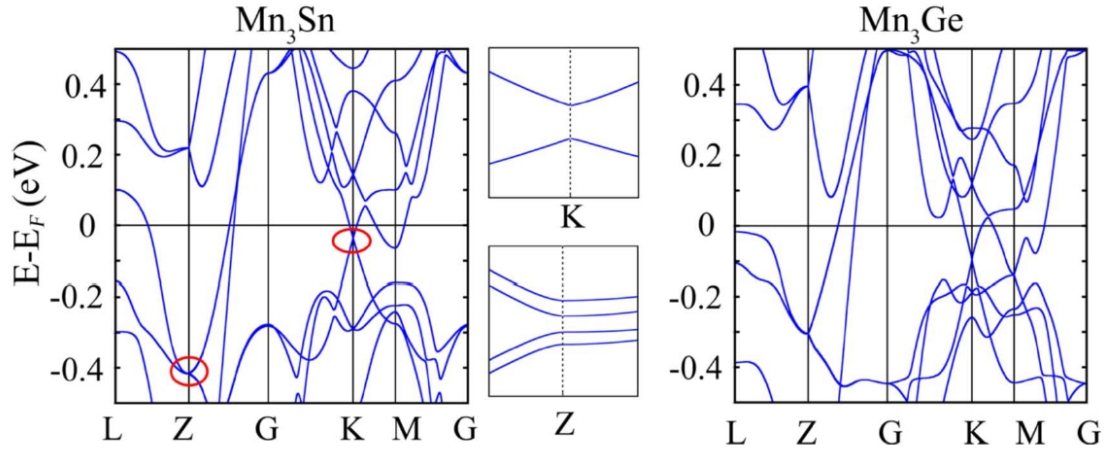
$$M_x T : (k_x, k_y, k_z) \rightarrow (k_x, -k_y, -k_z), \Omega^x \rightarrow -\Omega^x, \quad (4.9)$$

$$M_z T : (k_x, k_y, k_z) \rightarrow (-k_x, -k_y, k_z), \Omega^z \rightarrow -\Omega^z, \quad (4.10)$$

$$M_y : (k_x, k_y, k_z) \rightarrow (k_x, -k_y, k_z), \Omega^y \rightarrow +\Omega^y. \quad (4.11)$$

Zusätzlich zur nicht-kollinearen Spinstruktur bewirkt das verbleibende ferromagnetische Moment [124, 129] nur eine kleine Störung der Bandstruktur und verschiebt damit die Spiegelbilder der Weyl-Punkte um einen geringen Betrag im  $\mathbf{k}$ -Raum [127].

Die in dieser Arbeit verwendeten Mn<sub>3</sub>Ge Einkristalle wurden von Kaustuv Manna und Vicky Süss mithilfe der Bridgman-Stockbarger-Technik am Max Planck Institut für chemische Physik fester Stoffe in Dresden hergestellt. Zuerst wurden die hochreinen Metalle in einem Aluminiumtiegel mittels induktiver Wärmezufuhr geschmolzen und nach dem Abkühlen zu Pulver zerstoßen. Das Pulver wurde in ein Aluminiumröhrchen gefüllt und dieses in einem Tantalröhrchen versiegelt. Die Temperatur wurde mithilfe eines Thermometers an der Unterseite der Ampulle kontrolliert. Die Probe wurde auf 1000°C erhitzt, für 12 h auf dieser Temperatur gehalten und anschließend langsam auf 750°C abgekühlt. Abschließend wurde schlagartig auf Raumtemperatur abgekühlt um die hexagonale Hochtemperaturphase zu erhalten. Die Einkristallinität und die Kristallstruktur wurden mittels Röntgenbeugung überprüft.



**Abbildung 4.11:** Bandstruktur von Mn<sub>3</sub>Sn und Mn<sub>3</sub>Ge, errechnet im Rahmen einer Dichtefunktional-Theorie mit verallgemeinerter Gradientennäherung (GGA DFT) mithilfe des Vienna ab initio Simulationspakets (VASP) aus Ref. [127]. Die Spin-Bahn-Kopplung wurde berücksichtigt.

Weyl-Punkt	$k_x$	$k_y$	$k_z$	Chiralität	Energie (meV)
W <sub>1</sub>	-0,333	0,388	-0,000	-	57
W <sub>2</sub>	0,255	0,378	-0,000	+	111
W <sub>3</sub>	-0,101	0,405	0,097	-	48
W <sub>4</sub>	-0,004	0,419	0,131	+	8
W <sub>5</sub>	-0,048	0,306	0,164	+	77
W <sub>6</sub>	0,002	0,314	0,171	-	59
W <sub>7</sub>	-0,081	0,109	0,000	+	479
W <sub>8</sub>	0,069	-0,128	0,117	+	330
W <sub>9</sub>	0,004	-0,149	-0,000	+	470

**Tabelle 4.1:**  $\mathbf{k}$ -Raum-Koordinaten, Chiralität und Energie (Abstand zum Fermi-Niveau) der vorhergesagten Weyl-Punkte in Mn<sub>3</sub>Ge aus Ref. [127].

### 4.3.1 Transportmessungen an Mn<sub>3</sub>Ge

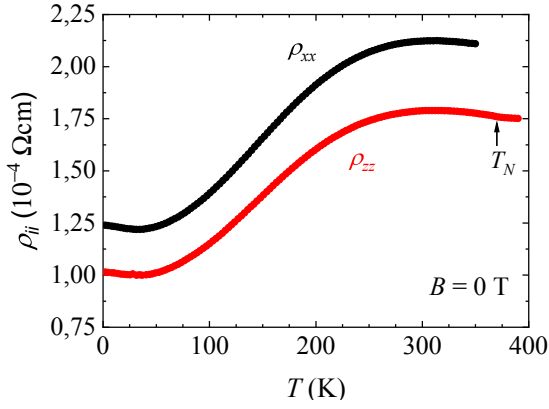
#### Elektrischer Transport

Elektrische Transportmessungen an Mn<sub>3</sub>Ge wurden von Kaustuv Manna am Max Planck Institut für chemische Physik fester Stoffe durchgeführt. Der elektrische Widerstand wurde entlang der  $x$ - ([2-1-10]) und der  $z$ -Richtung ([0001]) gemessen.  $\rho_{xx}$  und  $\rho_{zz}$  sind in Abhängigkeit der Temperatur in Abbildung 4.12a dargestellt. Beide Größen unterscheiden sich nur in ihren absoluten Werten, ansonsten zeigen sie einen ähnlichen Verlauf. Dieser kann mithilfe der Ableitung von  $\rho_{zz}$  nach der Temperatur (Abbildung 4.12b) näher untersucht werden. Ein Maximum bei  $T \approx 310$  K und ein Minimum bei  $T \approx 30$  K von  $\rho_{zz}$  sowie ein Wendepunkt bei  $T \approx 145$  K charakterisieren den Temperaturverlauf. Außerdem zeigt die Ableitung eindeutig den magnetischen Phasenübergang bei  $T_N \approx 370$  K. Eine nennenswerte Abhängigkeit des longitudinalen elektrischen Widerstands vom Magnetfeld konnte nicht festgestellt werden.

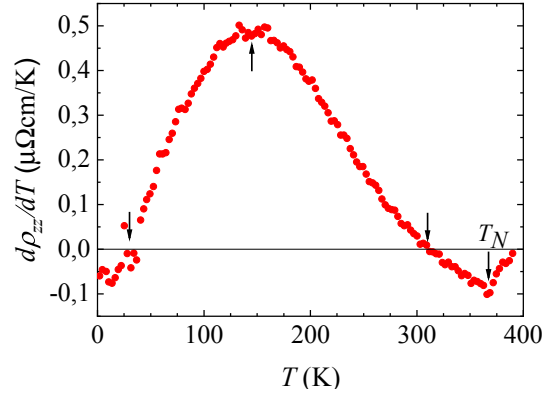
Die hier gezeigten Daten  $\rho_{zz}(T)$  und  $\rho_{xx}(T)$  (Abbildung 4.12a) unterschieden sich jedoch in einem Punkt von der Literatur. In Ref. [113, 115, 131] werden übereinstimmend sich in einem Temperaturbereich  $T \approx 200$  K schneidende Verläufe von  $\rho_{zz}(T)$  und  $\rho_{xx}(T)$  [115, 131] (bzw.  $\rho_{yy}(T)$  [113]) dargestellt, was von den hier vorgestellten Ergebnissen abweicht. Ferner findet man in der Literatur bezüglich der Äquivalenz von  $\rho_{xx}$  und  $\rho_{yy}$  widersprüchliche Angaben. Während in Ref. [115] identische  $\rho_{xx}(T)$  und  $\rho_{yy}(T)$  in Mn<sub>3</sub>Ge gemessen wurden, wurde in Ref. [113]  $\rho_{xx} > \rho_{yy}$  bestimmt, wobei sich  $\rho_{yy}$  und  $\rho_{zz}$  schneiden, während  $\rho_{xx}$  stets größer als  $\rho_{zz}$  ist (in Übereinstimmung zu Abbildung 4.12a). Dabei gilt in allen Quellen für tiefe Temperaturen stets  $\rho_{zz} < \rho_{xx}, \rho_{yy}$ . Eine Ursache für diese Abweichungen könnten die in der Literatur vielbeschriebenen stöchiometrischen Abweichungen der Zusammensetzungen von Mn<sub>3</sub>Ge sein, welche meist zu einem Defizit von Germanium und einem Überschuss von Mangan führen [115, 131].

Der Hall-Effekt wurde mithilfe eines Stroms  $I$  in  $z$ -Richtung ([0001]) und eines Magnetfeldes  $B$  in  $y$ -Richtung ([01-10]) gemessen. Die so bestimmte Hall-Leitfähigkeit  $\sigma_{xz}$  ist in Abbildung 4.13a in Abhängigkeit von  $B$  für verschiedene ausgewählte Temperaturen dargestellt. Auffallend ist, dass der Hall-Effekt ein nahezu komplett anomales Verhalten zeigt. Es existiert ein Sprung bei  $B = 0$  T, nach welchem  $\sigma_{xz}$  nur einen geringfügig weiteren Anstieg zeigt und anschließend ohne weitere Abhängigkeit vom Magnetfeld saturiert. Amplitude und Verlauf stimmen sehr gut mit bereits veröffentlichten Hall-Effekt Messungen an Mn<sub>3</sub>Ge überein [113, 115, 131].

Eine temperaturabhängige Messung der Hall-Leitfähigkeit  $\sigma_{xz}$  ist in Abbildung 4.13b dargestellt.  $\sigma_{xz}$  zeigt mit sinkender Temperatur einen monoton steigenden Verlauf, welcher in ein Plateau bei tiefen Temperaturen übergeht.

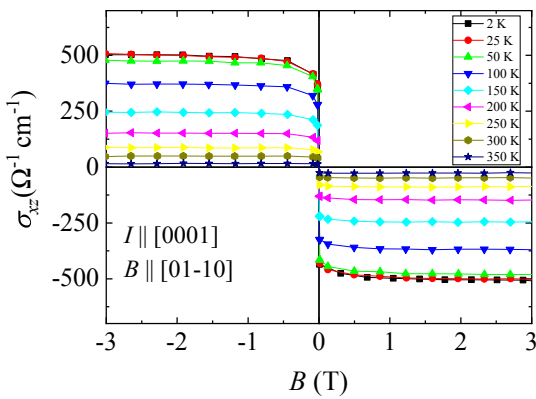


(a) Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstands von Mn<sub>3</sub>Ge aus Ref. [112].

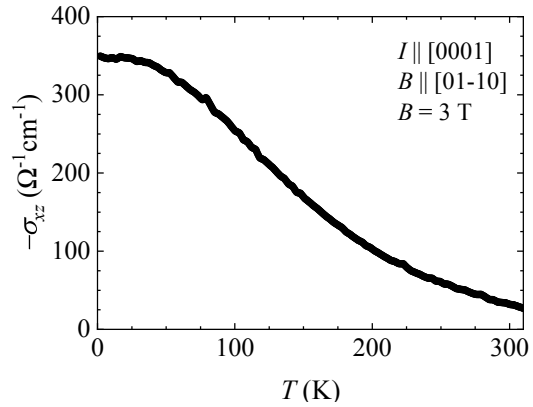


(b) Ableitung des elektrischen Widerstands entlang der  $z$ -Richtung nach der Temperatur. Die Pfeile markieren Extrem- und Wendepunkte von  $\rho_{zz}$  sowie den magnetischen Phasenübergang bei  $T_N$ .

**Abbildung 4.12:** Longitudinaler elektrischer Transport in Mn<sub>3</sub>Ge.

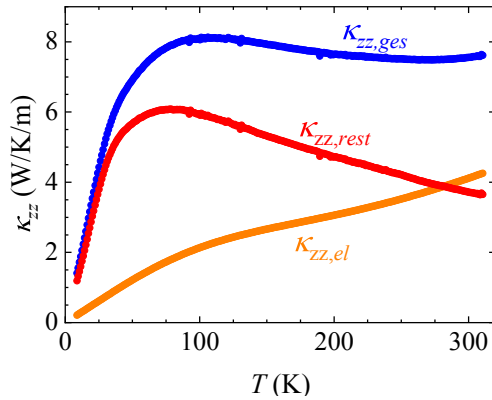


(a) Hall-Leitfähigkeit  $\sigma_{xz}$  in Abhängigkeit des Magnetfeldes für ausgewählte Temperaturen.

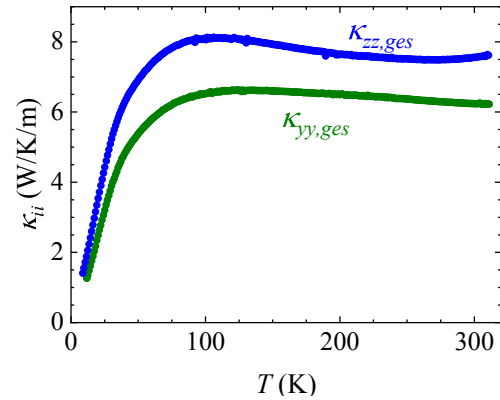


(b) Temperaturabhängigkeit der Hall-Leitfähigkeit  $\sigma_{xz}$ .

**Abbildung 4.13:** Hall-Effekt in Mn<sub>3</sub>Ge.



(a) Wärmeleitfähigkeit entlang der  $z$ -Richtung  $\kappa_{zz,ges}$  (blau) zusammen mit dem mithilfe des Wiedemann-Franz-Gesetzes abgeschätzten elektronischen Beitrag der Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{zz,el}$  (orange) und der aus der Differenz beider Größen berechneten Rest-Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{zz,rest}$  (rot).



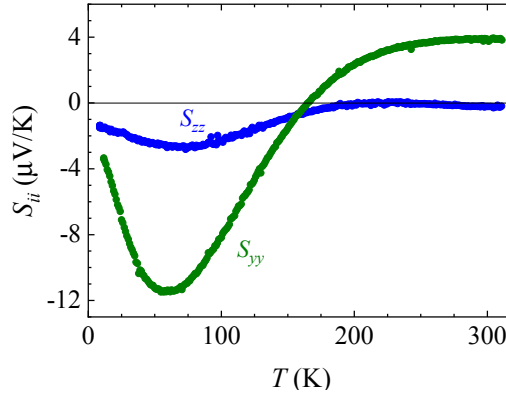
(b) Gemessene Wärmeleitfähigkeit in Abhängigkeit der Temperatur entlang der  $z$ - ( $\kappa_{zz,ges}$ , blau) und der  $y$ -Richtung ( $\kappa_{yy,ges}$ , grün) im Vergleich.

**Abbildung 4.14:** Wärmeleitfähigkeitsmessungen in Mn<sub>3</sub>Ge.

### Thermischer Transport

Die Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{ii}$  wurde in Mn<sub>3</sub>Ge entlang der  $z$ - und der  $y$ -Richtung gemessen. Abbildung 4.14a zeigt mit  $\kappa_{zz,ges}$  (blaue Punkte) das Ergebnis der Messung entlang der  $z$ -Richtung ( $j_Q$  und  $\nabla T \parallel [0001]$ ) in Abhängigkeit der Temperatur. Nach einem Anstieg von  $\kappa_{zz,ges}$  bei tiefen Temperaturen flacht die Kurve mit steigender Temperatur zu einem sehr breiten Maximum bei  $T \approx 105$  K und  $\kappa_{zz,ges} \approx 8$  W/K/m ab. Bei höheren Temperaturen entwickelt sich ein ungewöhnliches Minimum bei  $T \approx 275$  K und  $\kappa_{zz,ges} \approx 7$  W/K/m. Dieser flache Kurvenverlauf mit erneutem Anstieg bei hohen Temperaturen deutet auf zusätzliche dominante Beiträge zur Wärmeleitfähigkeit oder verstärkte Streuung der Phononen hin. Eine Abschätzung des elektronischen Beitrags kann mithilfe des Wiedemann-Franz-Gesetzes aus dem elektrischen Widerstand  $\rho_{zz}$  berechnet werden (siehe Abschnitt 2.1.3). Die resultierende elektronische Wärmeleitfähigkeit ist ebenfalls in Abbildung 4.14a als  $\kappa_{zz,el}$  (orangene Punkte) dargestellt.  $\kappa_{zz,el}$  steigt mit steigender Temperatur monoton bis zu einem Wert von ungefähr 4 W/K/m bei Raumtemperatur an.

Die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit in  $y$ -Richtung ( $j_Q$  und  $\nabla T \parallel [01-10]$ )  $\kappa_{yy,ges}$  ist in Abbildung 4.14b zusammen mit  $\kappa_{zz,ges}$  dargestellt.  $\kappa_{yy,ges}$  zeigt bei tiefen Temperaturen einen typischen Anstieg und bildet mit steigender Temperatur ein im Vergleich zu  $\kappa_{zz,ges}$  noch breiteres Maximum bei  $T \approx 125$  K und  $\kappa_{yy,ges} \approx 6,6$  W/K/m aus, welches sehr flach aber monoton bis Raumtemperatur abfällt. Die Wärmeleitfähigkeit bei Raumtemperatur ist mit ungefähr 6,2 W/K/m nur unwesentlich geringer als im Maximum. Der elektronische Beitrag



**Abbildung 4.15:** Seebeck-Koeffizient in Abhängigkeit der Temperatur entlang der  $z$ - und  $y$ -Richtung in Mn<sub>3</sub>Ge.

von  $\kappa_{yy}$  konnte an dieser Stelle nicht bestimmt werden, da keine Messung von  $\rho_{yy}$  vorliegt. Wie im Abschnitt 4.3.1 findet man in der Literatur widersprüchliche Aussagen bzgl. der Gleichheit des Absolutwertes von  $\rho_{xx}$  und  $\rho_{yy}$ , weswegen diesbezügliche Spekulationen hier nicht dargestellt werden. Auch die hier gezeigten Messungen der Wärmeleitfähigkeit zeigen Abweichungen zur Literatur. In Ref. [131] werden identische longitudinale Wärmeleitfähigkeiten  $\kappa_{xx}$  und  $\kappa_{zz}$  angegeben. Diese Unterschiede bestehen auch in Mn<sub>3</sub>Sn. Ref. [132] zeigt Messungen von  $\kappa_{ii}$  für die  $x$ -,  $y$ - und  $z$ -Richtung an Mn<sub>3</sub>Sn, wobei für alle  $T$  gilt  $\kappa_{zz} > \kappa_{yy} > \kappa_{xx}$ , während in Ref. [117] die Messungen  $\kappa_{yy} > \kappa_{zz}$  für Temperaturen über 100 K und darunter  $\kappa_{yy} \approx \kappa_{zz}$  ergeben. Somit bestehen für Mn<sub>3</sub>Ge und Mn<sub>3</sub>Sn Unklarheiten bzgl. der Anisotropie der longitudinalen Wärmeleitfähigkeit, welche stark probenabhängig zu sein scheint. Aufgrund dieser Erkenntnis und dem Fakt, dass die hier vorgestellten Messungen ( $\kappa_{zz}$  und  $\kappa_{yy}$ ) an zwei unterschiedlichen Kristallen der gleichen Charge durchgeführt wurden, soll im folgenden nicht weiter auf die Wärmeleitfähigkeit eingegangen werden.

### Thermoelektrischer Transport

Der Seebeck-Koeffizient wurde ebenfalls entlang der  $z$ - ( $j_Q$  und  $E \parallel [0001]$ ) und der  $y$ -Richtung ( $j_Q$  und  $E \parallel [01-10]$ ) gemessen. Die Temperaturabhängigkeiten von  $S_{zz}$  und  $S_{yy}$  sind in Abbildung 4.15 dargestellt. Für beide Konfigurationen ist der Temperaturverlauf von einem Minimum bei tiefen Temperaturen und einem Maximum bei hohen Temperaturen geprägt. Während  $S_{yy}$  ein Maximum bei  $T \approx 300$  K und rund  $4 \mu\text{V/K}$ , einen Vorzeichenwechsel bei  $T \approx 165$  K sowie ein Minimum bei  $T \approx 55$  K und  $S_{yy} \approx -11,5 \mu\text{V/K}$  aufweist, zeigt  $S_{zz}$  einen (im Rahmen der Messungenauigkeit) durchgehend negativen Verlauf mit einem Maximum bei  $T \approx 225$  K und  $S_{zz} \approx 0 \mu\text{V/K}$  sowie einem Minimum bei  $T \approx 75$  K und  $S_{zz} \approx -2,8 \mu\text{V/K}$ .

Messungen des Seebeck-Koeffizienten  $S_{xx}$  in Ref. [131] zeigen ebenfalls ein Minimum im Bereich  $T \approx 55$  K, jedoch mit Absolutwerten von rund  $25 \mu\text{V/K}$ . Der Vorzeichenwechsel erfolgt dabei bei  $T \approx 200$  K mit ähnlichen Absolutwerten bei hohen Temperaturen wie in den



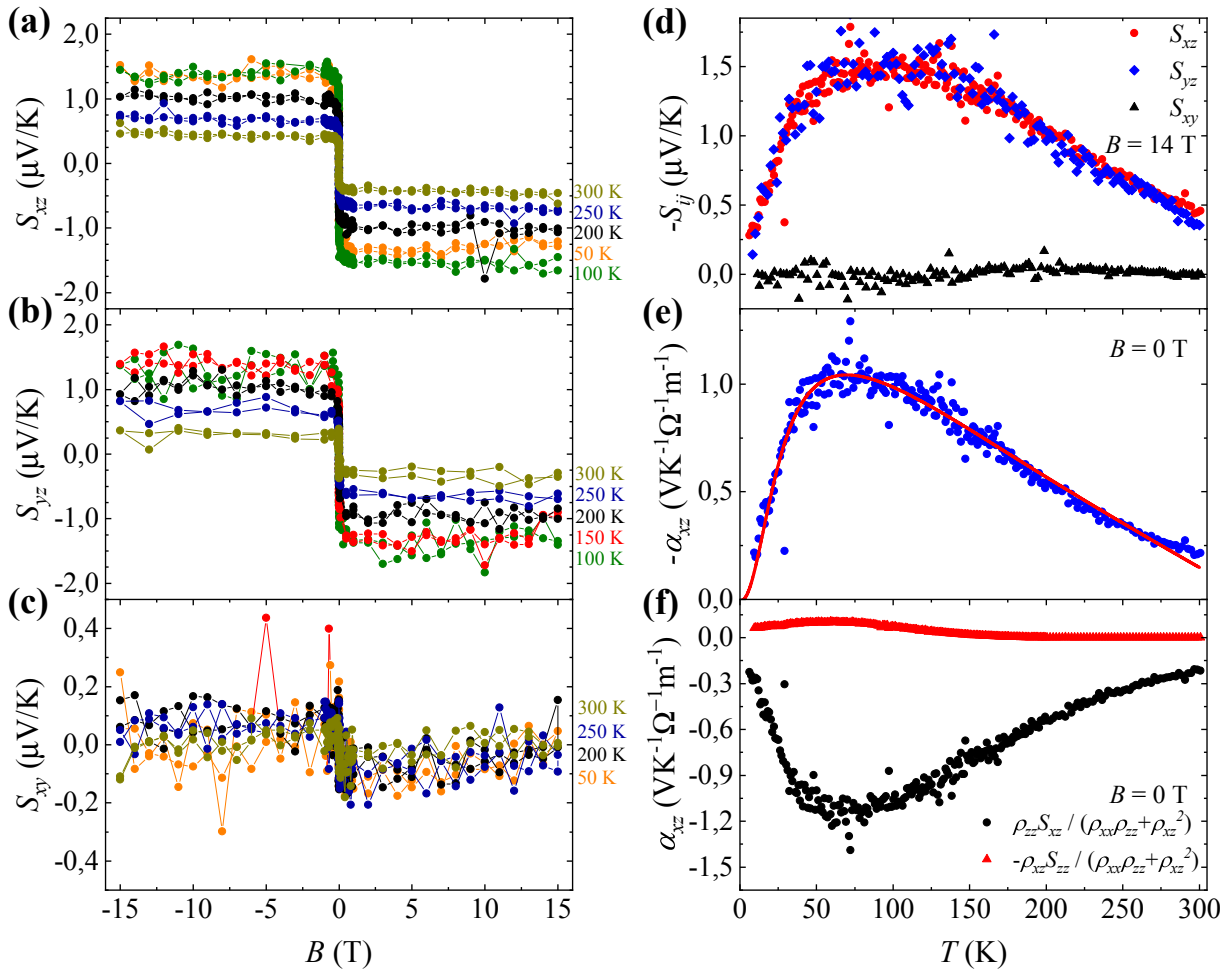
hier vorgestellten Messungen an  $S_{yy}$ . Ein Vergleich mit Messungen des Seebeck-Koeffizienten an  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  zeigt, dass das Minimum bei tiefen Temperaturen meist Werte im Bereich von ungefähr  $-10 \mu\text{V}/\text{K}$  annimmt. Für  $S_{xx}$  und  $S_{yy}$  wechselt das Vorzeichen im Temperaturbereich zwischen 100 K und 150 K [116, 117, 132]. Für  $S_{zz}$  geschieht dies erst bei wesentlich höheren Temperaturen zwischen 250 K und 300 K [117, 132].

#### 4.3.2 Nernst-Effekt in $\text{Mn}_3\text{Ge}$

Das Nernst-Signal  $S_{ij}$  hängt im Allgemeinen von der Temperatur und dem Magnetfeld ab (siehe Abschnitt 2.1.4). Deshalb wird  $S_{ij}$  in zwei verschiedenen Modi gemessen: Eine temperaturabhängige Messung des Nernst-Signals besteht aus zwei Einzelmessungen, die erste in Präsenz eines ausgewählten festen Magnetfeldes, die zweite mit invertiertem Magnetfeld (in dieser Arbeit meist  $B = 14 \text{ T}$  und  $B = -14 \text{ T}$ ). Danach werden die Daten antisymmetrisiert um zusätzliche Beiträge des Seebeck-Effekts aufgrund leicht verschobener elektrischer Kontakte herauszurechnen (vgl. Abschnitt 3.2.4). Eine magnetfeldabhängige Messung des Nernst-Signals wird bei konstanter Temperatur durchgeführt. Das Magnetfeld wird von positiven zu negativen Werten (oder andersherum) variiert und anschließend antisymmetrisiert. Dieses Vorgehen für Messungen der Magnetfeldabhängigkeit des Nernst-Signals war in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  nicht möglich, da bei kleinen Magnetfeldern ein hysteretisches Verhalten sichtbar wird (siehe Abschnitt 4.3.3), wodurch die  $S_{ij}(B)$ -Kurven von der Feldhistorie abhängen. Deshalb wurde die Feldabhängigkeit des Nernst-Signals in kompletten Feldzyklen gemessen (von  $B = -15 \text{ T}$  nach  $+15 \text{ T}$  und zurück nach  $-15 \text{ T}$ ). Anschließend wurden die symmetrischen Beiträge (Beiträge ohne Feldabhängigkeit) abgezogen und die Kurven somit um  $S_{ij} = 0$  zentriert, um den Vergleich von Messungen bei unterschiedlichen Temperaturen zu erleichtern.

Abbildung 4.16a zeigt das Nernst-Signal in der Konfiguration  $S_{xz}$  ( $\nabla T \parallel z$ ,  $U_N \parallel x$  und  $B \parallel y$ ) in Abhängigkeit von  $B$  für verschiedene ausgewählte Temperaturen.  $S_{xz}$  weist ein durchgehend anomales Verhalten (keine Abhängigkeit vom Magnetfeld) ohne jegliche normale Komponente (lineare Abhängigkeit vom Magnetfeld) auf. Mit steigendem Feld prägt sich bei sehr kleinen Magnetfeldern ( $B \approx 0,02 \text{ T}$ ) ein stufenförmiger Anstieg mit einer anschließenden Sättigung des Nernst-Signals aus. Auf diesen Anstieg wird in Abschnitt 4.3.3 näher eingegangen werden. Ein nahezu identisches Verhalten zeigt das Nernst-Signal in der Konfiguration  $S_{yz}$  ( $\nabla T \parallel z$ ,  $U_N \parallel y$  und  $B \parallel x$ ), die Abhängigkeit vom Magnetfeld ist in Abbildung 4.16b dargestellt. Beide Konfigurationen zeigen das anomale saturierende Verhalten für alle gemessene Temperaturen bis einschließlich Raumtemperatur. Im Gegensatz dazu entsteht in der Konfiguration  $S_{xy}$  ( $\nabla T \parallel y$ ,  $U_N \parallel x$  und  $B \parallel z$ ) ein wesentlich kleineres Nernst-Signal (vgl. Abbildung 4.16c). Der stufenförmige Anstieg bei kleinen Magnetfeldern ist nur gering ausgeprägt und die Daten zeigen einen zusätzlichen normalen Beitrag. Eine Temperaturabhängigkeit ist hier kaum erkennbar.

In Abbildung 4.16d sind die Nernst-Signale bei  $B = 14 \text{ T}$  in Abhängigkeit der Temperatur



**Abbildung 4.16:** (a)-(c) Nernst-Signal in Mn<sub>3</sub>Ge in Abhängigkeit des Magnetfeldes für verschiedene Messkonfigurationen und ausgewählte Temperaturen. Zusätzliche Datensätze sind im Anhang A.1 dargestellt.  $S_{ij}$  resultiert aus einer Messung der Spannung entlang der  $i$ -Richtung mit einem Temperaturgradienten entlang der  $j$ - und einem Magnetfeld entlang der  $k$ -Richtung. (d) Temperaturabhängigkeit der Nernst-Signale  $S_{ij}$ . (e) Mithilfe von  $\alpha_{xz} = \rho_{zz}S_{xz} - \rho_{xz}S_{zz}/\rho_{xx}\rho_{zz} + \rho_{xz}^2$  errechneter transversaler Peltier-Koeffizient in Abhängigkeit der Temperatur (blaue Punkte). Rote Linie: Aus theoretischen Betrachtungen gewonnene Anpassungsfunktion. (f) Temperaturabhängigkeit der beiden Beiträge zu  $\alpha_{xz}$ .

für alle gemessenen Konfigurationen dargestellt. Ein breites Maximum von rund  $1,5 \mu\text{V/K}$  bei  $T \approx 100$  K charakterisiert den Verlauf von  $S_{xz}$  und  $S_{yz}$ ,  $S_{xy}$  erscheint dagegen vernachlässigbar klein.  $S_{xz}$  und  $S_{yz}$  weisen auch bei Raumtemperatur noch einen sehr großen Wert von ungefähr  $0,4 \mu\text{V/K}$  auf.

### Theoretische Modellierung

Das Nernst-Signal  $S_{xz}$  kann allgemein durch die Elemente des thermoelektrischen Leitfähigkeitstensors  $\bar{\alpha}$  (Peltier-Koeffizient) und des elektrischen Leitfähigkeitstensors  $\bar{\sigma}$  ausgedrückt

werden (vgl. Abschnitt 2.1.4):

$$S_{xz} = \frac{\alpha_{xz}\sigma_{xx} - \alpha_{xx}\sigma_{xz}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xz}^2}. \quad (4.12)$$

Hierbei stellt jeder transversale Transportkoeffizient die Summe aus jeweils einem normalen und anomalen Beitrag dar. Das komplett anomale Verhalten von  $S_{xz}$  (und  $S_{yz}$ , vgl. Abbildung 4.16a und 4.16b) ohne sichtbare normale Feldabhängigkeit lässt darauf schließen, dass in Mn<sub>3</sub>Ge keine normalen Beiträge existieren bzw. dass diese vernachlässigt werden können. Deshalb werden zur Auswertung nur anomale transversale Transportkoeffizienten herangezogen. Wie in Abschnitt 2.2 beschrieben, hängen die anomalen Beiträge der Peltier- und Hall-Koeffizienten  $\alpha_{xz}$  und  $\sigma_{xz}$  von einem  $\mathbf{k}$ -Integral über die  $y$ -Komponente der Berry-Krümmung  $\Omega = (\Omega^x, \Omega^y, \Omega^z)$  ab:

$$\sigma_{xz}^A = \frac{e^2}{\hbar} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Omega^y(\mathbf{k}) f_{\mathbf{k}}, \quad (4.13)$$

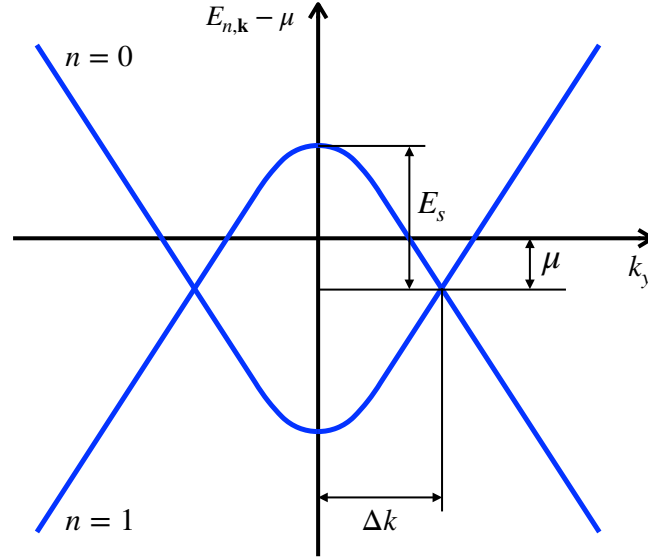
$$\alpha_{xz}^A = \frac{k_B e}{\hbar} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Omega^y(\mathbf{k}) s_{\mathbf{k}}. \quad (4.14)$$

Da in Mn<sub>3</sub>Ge ein großes anomales Nernst-Signal  $S_{xz}$  gemessen wurde (vgl. Abbildung 4.16a), muss die integrierte  $y$ -Komponente der Berry-Krümmung  $\Omega^y$  ebenfalls groß sein. Aus dem nahezu gleichen Verhalten von  $S_{yz}$  (vgl. Abbildung 4.16b) lässt sich die gleiche Aussage für  $\Omega^x$  herleiten.  $S_{xy}$  zeigt hingegen keinen klaren anomalen Beitrag. Daraus folgt, dass die integrierten  $x$ - und  $y$ -Komponenten der Berry-Krümmung groß sind, während die integrierte  $z$ -Komponente verschwindet.  $\Omega^z$  ist also entweder Null oder eine ungerade Funktion. Diese Schlussfolgerungen stimmen mit Symmetriebetrachtungen der Bandstruktur überein [125, 127], wonach  $\Omega^z$  eine ungerade Funktion in  $k_z$  ist (vgl. Gleichungen 4.9, 4.10 und 4.11), während im Falle eines Magnetfeldes in  $x$ -Richtung  $\Omega^x$  gerade in  $k_x$  bzw. eines Magnetfeldes in  $y$ -Richtung  $\Omega^y$  gerade in  $k_y$  ist.

Eine zweite Schlussfolgerung kann aus dem Temperaturverlauf von  $S_{xz}$  und  $S_{yz}$  (siehe Abbildung 4.16d) gezogen werden. Wie bereits ausführlich in Abschnitt 4.2.2 (vgl. Abbildung 4.8) beschrieben wurde, bestimmt die Lage des chemischen Potentials relativ zu den Weyl-Punkten wesentlich die Temperaturabhängigkeit des Nernst-Signals. Aus der Position des Maximums von  $S_{xz}$  und  $S_{yz}$  bei  $T \approx 100$  K kann die Energie der dominierenden Weyl-Punkte auf  $|\mu| \approx 10$  meV abgeschätzt werden.

Nach dieser qualitativen Analyse des anomalen Nernst Effekts soll nun mithilfe von theoretischen Betrachtungen ein quantitativer Zugang zur Weyl-Physik von Mn<sub>3</sub>Ge entwickelt werden. Da das anomale Nernst-Signal nicht direkt von der Berry-Krümmung abhängt, muss zunächst der transversale Peltier-Koeffizient berechnet werden:

$$\alpha_{xz} = \frac{\rho_{zz}S_{xz} - \rho_{xz}S_{zz}}{\rho_{xx}\rho_{zz} + \rho_{xz}^2}. \quad (4.15)$$



**Abbildung 4.17:** Schematische Darstellung der Bandstruktur eines Weyl-Punkte-Paars in der Nähe der Fermi-Energie aus Ref. [112]. Die Weyl-Punkte unterschiedlicher Chiralität befinden sich im Abstand  $\mu$  von der Fermi-Energie entfernt und der Sattelpunkt besitzt eine Energie von  $E_s$ . Der Abstand der Bandkreuzungen von  $k_y = 0$  wird als  $\Delta k$  definiert.

Diese Darstellung von  $\alpha_{xz}$  in Abhängigkeit der Widerstände  $\rho_{xx}$ ,  $\rho_{zz}$  und  $\rho_{xz}$  wurde in Abschnitt 2.1.4 hergeleitet. Die gemessenen Temperaturabhängigkeiten der Transportkoeffizienten wurden in Kapitel 4.3.1 gezeigt. Der sich aus Gleichung 4.15 ergebende transversale Peltier-Koeffizient  $\alpha_{xz}$  ist in Abhängigkeit der Temperatur in Abbildung 4.16e dargestellt. Der Verlauf ähnelt dem des Nernst-Signals, jedoch zeigt  $\alpha_{xz}$  im Vergleich zu  $S_{xz}$  ein schmaleres Maximum bei  $T \approx 75$  K. In Abbildung 4.16f sind die beiden Beiträge  $\rho_{zz}S_{xz}/(\rho_{xx}\rho_{zz} + \rho_{xz}^2)$  und  $-\rho_{xz}S_{zz}/(\rho_{xx}\rho_{zz} + \rho_{xz}^2)$  einzeln in Abhängigkeit der Temperatur gezeigt. Der Vergleich zeigt eindeutig, dass das anomale Nernst-Signal den transversalen Peltier-Koeffizienten dominiert.

Die im Folgenden dargelegte Herleitung einer theoretischen Beschreibung von  $\alpha_{xz}$  wurde von Steffen Sykora durch Erweiterung der theoretischen Betrachtungen aus Ref. [106] erstellt. Da weder  $\rho_{zz}$ ,  $\rho_{xx}$  sowie  $S_{zz}$  eine nennenswerte Abhängigkeit vom Magnetfeld und sowohl  $\rho_{xz}$  als auch  $S_{xz}$  ein anomales Verhalten mit einem endlichen Wert bei  $B = 0$  T aufweisen, ist auch  $\alpha_{xz}$  anomal und endlich bei  $B = 0$  T. Somit kann  $\alpha_{xz}$  allgemein für ein Multibandsystem durch seinen anomalen Beitrag ausgedrückt werden:

$$\alpha_{xz} = \frac{e^2}{\hbar} \sum_n \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Omega_n^y(\mathbf{k}) s_{n,\mathbf{k}}. \quad (4.16)$$

Hierbei ist  $s_{n,\mathbf{k}}$  die Entropiedichte für die Dispersion  $E_{n,\mathbf{k}}$  des Leitungsbandes  $n$ .  $\Omega_n(\mathbf{k})$  ist der Vektor der Berry-Krümmung für Band  $n$ . Es wird angenommen, dass die Berry-Krümmung, welche den anomalen Transport hervorruft, hauptsächlich von einem Paar von Weyl-Punkten stammt, die sehr nah an der Fermi-Fläche liegen [127]. Abbildung 4.17 zeigt die hier betrachtete

Modell-Bandstruktur mit zwei Bändern  $n$ , welche sich in zwei Weyl-Punkten berühren.  $n = 0$  bezeichnet das energetisch höher gelegene Band mit  $E_{0,\mathbf{k}} > 0$  und  $n = 1$  das energetisch niedriger gelegene Band mit  $E_{1,\mathbf{k}} < 0$ , wobei die Weyl-Punkte bei  $E = 0$  liegen. Ausgehend von einem minimalen Modell linearisierter Weyl-Fermionen [93], beschreibt

$$E_{n,\mathbf{k}} = \pm v_F \sqrt{k_x^2 + (k_y \pm \Delta k)^2 + k_z^2} \quad (4.17)$$

die Bandstruktur in der Nähe eines Weyl-Punkte-Paars bei  $E = 0$ , welche einen Abstand im Impulsraum entlang der  $k_y$ -Richtung von  $2\Delta k$  aufweisen.

Zunächst wird das Impuls-Integral in Gleichung 4.16 durch ein Energie-Integral ersetzt,

$$\alpha_{xz} = \frac{e^2}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dE \rho_1(E) \Omega_1^y(E) s(E) + \frac{e^2}{\hbar} \int_0^{\infty} dE \rho_0(E) \Omega_0^y(E) s(E), \quad (4.18)$$

wobei  $\rho_n(E)$  die Zustandsdichte des jeweiligen Bands  $n$  beschreibt. Diese lässt sich für die Bandstruktur aus Gleichung 4.17 schreiben als

$$\rho_0(E) = \begin{cases} 0 & : E < 0 \\ \rho_0 E^2 & : 0 \leq E \leq E_s \\ \frac{\rho_0}{2} E(E_s + E) & : E > E_s \end{cases}, \quad (4.19)$$

$$\rho_1(E) = \begin{cases} 0 & : E > 0 \\ \rho_0 E^2 & : -E_s \leq E \leq 0 \\ \frac{\rho_0}{2} E(-E_s + E) & : E < -E_s \end{cases}. \quad (4.20)$$

$\rho_0$  ist dabei eine Konstante (in Bezug auf die Energie) und  $E_s = v_F \Delta k$  der Energieunterschied zwischen den Weylpunkten und dem Sattelpunkt bei  $\mathbf{k} = 0$ . Die gesamte Zustandsdichte  $\rho = \rho_0 + \rho_1$  ist symmetrisch ( $\rho(-E) = \rho(E)$ ) und verschwindet am Weyl-Punkt ( $\rho(0) = 0$ ). Eine explizite Darstellung der Energieabhängigkeit der Entropiedichte  $s(E)$  in Gleichung 4.18 ist

$$s(E) = \frac{\ln(1 + e^{\beta(E-\mu)})}{1 + e^{\beta(E-\mu)}} + \frac{\ln(1 + e^{-\beta(E-\mu)})}{1 + e^{-\beta(E-\mu)}}, \quad (4.21)$$

mit dem chemischen Potenzial  $\mu$  und der inversen Temperatur  $\beta = 1/(k_B T)$ . Hierbei muss beachtet werden, dass das chemische Potenzial auch von der Temperatur abhängen kann und nur bei  $T = 0$  der Fermi-Energie entspricht. Wie in Abschnitt 2.2.1 beschrieben, kann die Berry-Krümmung mithilfe der Kubo-Formel [63] berechnet werden:

$$\Omega_n(\mathbf{k}) = i\hbar^2 \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \hat{\mathbf{v}} | \psi_{m,\mathbf{k}} \rangle \times \langle \psi_{m,\mathbf{k}} | \hat{\mathbf{v}} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle}{(E_{n,\mathbf{k}} - E_{m,\mathbf{k}})^2}, \quad (4.22)$$

wobei  $|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$  die Bloch-Zustände und  $\hat{\mathbf{v}}$  den Geschwindigkeitsoperator beschreiben. Innerhalb des hier betrachteten linearisierten Modells wird die Energie-Abhängigkeit der Matrix-

Elemente des Geschwindigkeitsoperators vernachlässigt und außerdem angenommen, dass die Berry-Krümmung für beide Bänder gleich ist. Deshalb wird die Energie-Abhängigkeit einer Komponente von  $\Omega_n$  vom quadratischen Term im Nenner von Formel 4.22 bestimmt. Daher wird für die  $y$ -Komponente

$$\Omega_0^y(E) = \Omega_1^y(E) = \frac{\hbar^2 \tilde{\Omega}}{4E^2} \quad (4.23)$$

gesetzt. Hierbei repräsentiert  $\tilde{\Omega}$  die Nebendiagonalelemente des Geschwindigkeitsoperators in Gleichung 4.22 in einem Feld, welches die Zeitumkehrsymmetrie des Systems bricht. In Gleichung 4.23 ist ferner zu beachten, dass die Berry-Krümmung an der Weyl-Punkt-Energie  $E = 0$  divergiert. Mithilfe der Gleichungen 4.19, 4.20 und 4.23 erhält man aus Gleichung 4.18:

$$\alpha_{xz} = \frac{e^2 \hbar \tilde{\Omega} \rho_0}{4} \left[ \int_{-E_s}^{E_s} s(E) dE + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{-E_s} \frac{-E_s + E}{E} s(E) dE + \frac{1}{2} \int_{E_s}^{\infty} \frac{E_s + E}{E} s(E) dE \right], \quad (4.24)$$

wobei für  $s(E)$  der Ausdruck 4.21 eingesetzt werden muss,  $\mu$  und  $\beta$  werden dabei als konstant in der Energie betrachtet. Um eine Anpassungsfunktion für die Temperaturabhängigkeit von  $\alpha_{xz}$  und die Lösung der Integrale zu vereinfachen, wird die Energie  $E$  als Variable durch die Fermi-Verteilung  $F(E) = 1/(1 + e^{\beta E})$  (mit  $\beta = 1/(k_B T)$ ) ersetzt, welche nur Werte zwischen 0 und 1 annehmen kann. Anschließend wird eine Taylor-Entwicklung um den Wert  $1/2$  bis zur ersten Ordnung in  $(F - 1/2)$  durchgeführt, welche aufgrund der Exponentialfunktionen in  $s(E)$  schnell konvergiert, solange die Temperatur nicht zu hoch ist. Anschließend wird über  $F$  integriert und man erhält

$$\begin{aligned} \alpha_{xz} = & C_\alpha k_B T \left[ 1 - \frac{E_s}{\mu} - \frac{E_s k_B T}{\mu^2} + F(-E_s - \mu) \left( 1 + \frac{E_s}{\mu} - 2 \frac{E_s k_B T}{\mu^2} \right) \right. \\ & \left. + F(E_s - \mu) \left( -1 + \frac{E_s}{\mu} - 2 \frac{E_s k_B T}{\mu^2} \right) + 2 \frac{E_s k_B T}{\mu^2} (F^2(E_s - \mu) - F^2(-E_s - \mu)) \right], \end{aligned} \quad (4.25)$$

mit  $C_\alpha = (e^2 \hbar \tilde{\Omega} \rho_0 \ln 2)/2$ . Dabei beinhaltet  $\tilde{\Omega}$  (siehe Gleichung 4.22 und 4.23) die nebendiagonalen Geschwindigkeitsmatrix-Elemente der Berry Krümmung und  $\rho_0$  stellt die Amplitude der Zustandsdichte dar (siehe Gleichung 4.19 und 4.20), welche die Band-Dispersion charakterisiert.

Das chemische Potenzial ist im Allgemeinen von der Temperatur abhängig.  $\mu(T)$  kann aus der Relation mit der Teilchenzahl  $N$  bestimmt werden.  $N$  ergibt sich aus einem Integral über die Fermi-Verteilung als

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} F(E - \mu) \rho(E) dE, \quad (4.26)$$

mit der gesamten Zustandsdichte  $\rho(E) = \rho_0(E) + \rho_1(E)$ . Leider kann die Lösung  $\mu(N, T)$  von Gleichung 4.26 nur numerisch gefunden werden. Um einen analytischen Ausdruck für  $\mu(T)$  zu erhalten, wird deshalb das exponentielle Verhalten der Fermi-Verteilung  $F(E - \mu)$  um  $E = \mu$  mit einer linearen Abhängigkeit in  $E$  ersetzt. Dabei wird  $F(E - \mu)$  so angepasst, dass

ein linearer Abfall zu 0 in einem Energiebereich  $k_B T$  um  $E = \mu$  entsteht. Für Energiewerte außerhalb dieses Bereichs wird  $F$  jeweils 0 oder 1 gesetzt. Diese Näherung gilt solange die Temperatur nicht zu hoch ist ( $k_B T < 2E_S$ ). Somit folgt aus Gleichung 4.26 ein genäherter Ausdruck für die Teilchenzahl:

$$N \approx \int_{-\infty}^{-E_S} \frac{\rho_0}{2} E(-E_S + E) dE + \int_{-E_S}^{\mu - \frac{k_B T}{2}} \rho_0 E^2 dE + \rho_0 \mu^2 \frac{k_B T}{2}. \quad (4.27)$$

Nach einer Ableitung nach  $(k_B T)$  erhält man die folgende Differentialgleichung für das chemische Potenzial:

$$0 \approx \mu^2 \mu' + \mu \frac{k_B T}{2} + \left( \frac{k_B T}{2} \right)^2 \left( \mu' - \frac{1}{2} \right). \quad (4.28)$$

Bei  $T = 0$  ist  $\mu' = 0$  und für hohe Temperaturen ( $\mu \ll k_B T$ ) verhält sich  $\mu$  linear mit der Temperatur ( $\mu \propto k_B T$ ). Es kann also die folgende Temperaturabhängigkeit, welche die jeweiligen Grenzverhalten erfüllt, angenähert werden:

$$\mu(T) \approx \sqrt{\mu_0^2 + (A k_B T)^2}, \quad (4.29)$$

wobei  $\mu_0 = \mu(T = 0)$  ist.  $\mu_0$  ist der Energieabstand der Weyl-Punkte zur Fermi-Energie (vgl. Abbildung 4.17). Die dimensionslose Konstante  $A$  lässt sich bestimmen, indem der Ansatz 4.29 in die Differentialgleichung 4.28 für  $k_B T \ll \mu$  eingesetzt wird. Daraus resultiert die folgende Gleichung für  $A$ ,

$$A^3 + \frac{3}{4}A - \frac{1}{8} \approx 0, \quad (4.30)$$

welche mit  $A \approx 0,162$  gelöst werden kann. Diese Konstante bestimmt das Temperaturverhalten des chemischen Potenzials im Hochenergiebereich, weshalb für ein Multiband-Material, in welchem mehrere Weyl-Punkte-Paare auftreten, für  $A$  ein Wert größer als 0,162 erwartet wird.  $A$  repräsentiert dabei qualitativ die Anzahl elektronischer Freiheitsgrade des Systems am Fermi-Niveau. Solange es keine sonstigen normalen Bänder gibt, entspricht diese Zahl ungefähr der Anzahl an hochenergetischen Weyl-Punkten mal 0,162. Deshalb kann in Gleichung 4.29 die Variable  $A$  mit der Anzahl der Weyl-Punkte  $N_W$  ersetzt werden:

$$\mu(T) \approx \sqrt{\mu_0^2 + (0.162 \cdot N_W \cdot k_B T)^2}. \quad (4.31)$$

Somit können die Gleichungen 4.25 und 4.31 als Anpassungsformel genutzt werden, um die Temperaturabhängigkeit von  $\alpha_{xz}$  zu modellieren. Die Parameter  $N_W$ ,  $C_\alpha$ ,  $\mu_0$  und  $E_S$  lassen dabei sowohl qualitative als auch quantitative Aussagen über die Bandstruktur zu.  $\mu_0$  ist der Energieabstand des Weyl-Punkte-Paares zur Fermi-Energie bei  $T = 0$  und wird in Bandstrukturechnungen als die Weyl-Punkt-Energie bezeichnet.  $E_S$  beschreibt die Energie des Sattelpunkts der Bandstruktur zwischen zwei Weyl-Punkten entgegengesetzter Chiralität und lässt mithilfe der Relation  $E_S = v_F \Delta k$  Rückschlüsse auf den Abstand der Weyl-Punkte im Impuls-

raum und die Fermi-Geschwindigkeit  $v_F$  (Anstieg der linearen Dispersion am Weyl-Punkt) zu.  $E_S$  und  $\mu_0$  sind somit bandstrukturgeometrische Eigenschaften der Weyl-Punkte, welche am nächsten an der Fermi-Energie liegen.  $C_\alpha = (e^2 \hbar \tilde{\Omega} \rho_0 \ln 2)/2$  bestimmt die Größenordnung von  $\alpha_{xz}$  und ist direkt proportional zur Zustandsdichte  $\rho_0$  und der experimentell relevanten Stärke der Berry-Krümmung in der Nähe der Fermi-Energie  $\tilde{\Omega}$ .

### 4.3.3 Auswertung

#### Auswertung der Anpassungsparameter

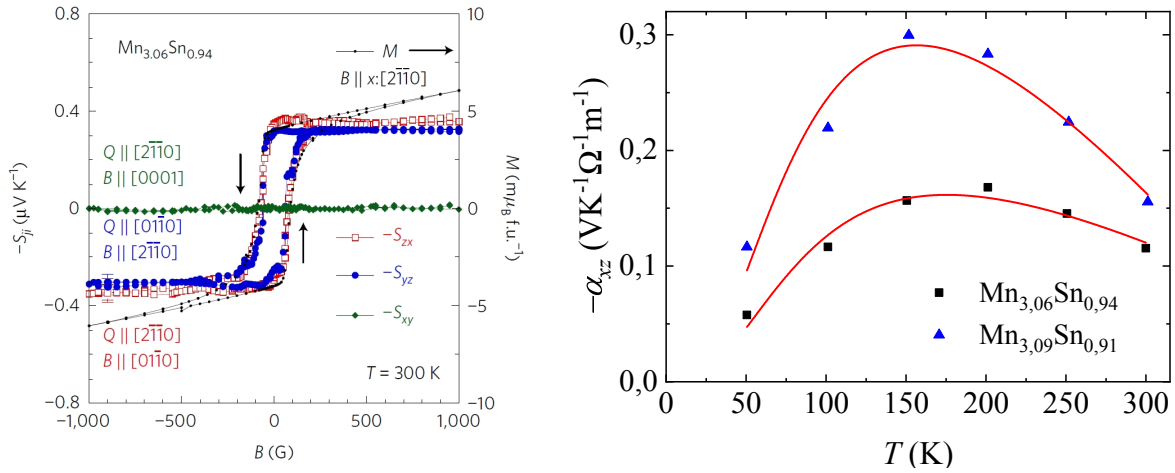
Nun können die Gleichungen 4.25 und 4.31 genutzt werden, um den aus den gemessenen Transportkoeffizienten bestimmten transversalen Peltier-Koeffizienten (vgl. Gleichung 4.15 und Abbildung 4.16e) zu fitten. Die so erhaltene angepasste Kurve ist als rote Linie in Abbildung 4.16e dargestellt. Die Kurvenanpassung funktioniert sehr gut bis auf den Bereich hoher Temperaturen über 250 K. Diese Abweichung ist der Näherung im Rahmen der Taylor-Entwicklung geschuldet, welche für die Herleitung von Gleichung 4.25 benötigt wurde. Folgende Parameter wurden extrahiert:

Parameter	Wert	Fehlerbereich
$\mu_0$	6,6 meV	$\pm 0,7$ meV
$E_S$	90 meV	$\pm 25$ meV
$N_W$	17,8	$\pm 2,2$
$C_\alpha$	$0,030 \text{ V(K}\Omega\text{m)}^{-1}$	$\pm 0,002 \text{ V(K}\Omega\text{m)}^{-1}$

Die Energie des am nächsten am Fermi-Niveau gelegenen Weyl-Punkte-Paars ist demnach  $\mu_0 = 6,6 \pm 2,2$  meV. Dieser Bereich stimmt sehr gut mit dem, in Abschnitt 4.3 vorgestellten, aus Bandstrukturechnungen erhaltenen Energiewert von 8 meV für den Weyl-Punkt  $W_4$  aus Ref. [127] überein. Außerdem lässt sich aus der Sattelpunktenergie  $E_S$  zusammen mit einer abgeschätzten Fermi-Geschwindigkeit  $v_F \approx 1 \text{ eV}/\pi$  [127] und der Annahme  $E_S = v_F \Delta k$  eine Separation des Weyl-Punkte-Paars im  $\mathbf{k}$ -Raum abschätzen. Sowohl der daraus erhaltene Abstand  $\Delta k \approx 0,09 \pi$  als auch die Anzahl der Weyl-Punkte  $N_W = 17,8 \pm 2,2$  stimmen gut mit den Bandstrukturechnungen überein [127]. Durch die Anpassung der Temperaturabhängigkeit des transversalen Peltier-Koeffizienten  $\alpha_{xz}$  lassen sich somit essentielle  $\mathbf{k}$ -Raum-Eigenschaften der Bandstruktur in der Nähe der Weyl-Punkte und der Fermi-Energie bestimmen. Damit wurde gezeigt, dass der anomale Nernst-Effekt nicht nur durch seine bloße Existenz einen Hinweis auf die integrierte Berry-Krümmung in der Nähe des Fermi-Niveaus gibt (siehe Abschnitt 4.3.2 und Ref. [106]), sondern auch Zugriff auf wichtige geometrische Eigenschaften der Bandstruktur im Impulsraum gewährt.

Der verbliebene Parameter  $C_\alpha = 0,030 \pm 0,002 \text{ V(K}\Omega\text{m)}^{-1}$  hingegen enthält materialspezifische Informationen über die Berry-Krümmung in der Nähe des Fermi-Niveaus (vgl. Abschnitt





(a) Nernst-Signal von  $\text{Mn}_{3,06}\text{Sn}_{0,94}$  in Abhängigkeit des Magnetfeldes für verschiedene Konfigurationen von Temperaturgradient, Magnetfeld und gemessener Spannung. Zusätzlich sind die Daten der Magnetisierung (schwarze Punkte, rechte Achse) eingetragen.

(b) In Ref. [116] bestimmtes  $\alpha_{xz}$ . Die Anpassungen der Daten sind jeweils als rote Linie eingetragen. Es ergeben sich Werte von  $\mu_0 = 45$  meV und  $C_\alpha = 0,004 \text{ V}(\text{K}\Omega\text{m})^{-1}$  für  $\text{Mn}_{3,06}\text{Sn}_{0,94}$  (schwarze Vierecke) sowie  $\mu_0 = 108$  meV und  $C_\alpha = 0,010 \text{ V}(\text{K}\Omega\text{m})^{-1}$  für  $\text{Mn}_{3,09}\text{Sn}_{0,91}$  (blaue Dreiecke).

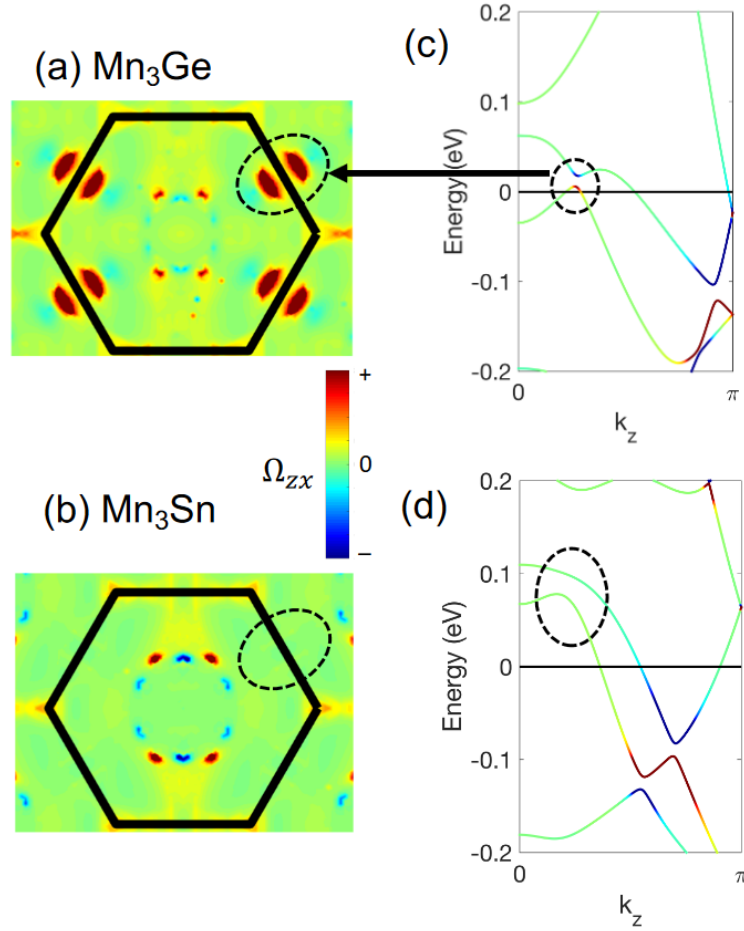
**Abbildung 4.18:** Nernst-Effekt in  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  aus Ref. [116].

4.3.2). Es ist sinnvoll, diesen Parameter mit anderen Materialien zu vergleichen, die ebenfalls Kandidaten für Weyl-Systeme sind. Um eine vergleichende Aussage über die Berry-Krümmung zu treffen, ist es am besten, ein Material mit ähnlicher Zustandsdichte  $\rho_0$  heranzuziehen, da gilt:

$$C_\alpha = \frac{e^2 \hbar \ln 2}{2} \tilde{\Omega} \rho_0. \quad (4.32)$$

Deshalb wurde eine identische Analyse an  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  mithilfe von Daten aus Ref. [116] für die Systeme  $\text{Mn}_{3,06}\text{Sn}_{0,94}$  und  $\text{Mn}_{3,09}\text{Sn}_{0,91}$  durchgeführt. Diese leicht nichtstöchiometrischen Verbindungen wurden in Ref. [116] verwendet, um den Phasenübergang zum Grundzustand in  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  zu unterdrücken.

Abbildung 4.18a zeigt Messungen von  $S_{ij}$  an  $\text{Mn}_{3,06}\text{Sn}_{0,94}$  in Abhängigkeit vom Magnetfeld bei  $T = 300$  K. Die Messungen weisen für Konfigurationen, in denen der Temperaturgradient und das Magnetfeld innerhalb der Kristallebenen liegt, das gleiche anomale Verhalten auf, welches auch in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  gemessen wurde (vgl. Abbildung 4.16a-c). Auch der Absolutwert von ungefähr  $0,4 \mu\text{V}/\text{K}$  stimmt überein. Jedoch ist  $\alpha_{xz}$  in  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  um eine Größenordnung geringer als in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$ , was auf eine wesentlich geringere Berry-Krümmung am Fermi-Niveau in  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  hinweist, da beide Materialien eine ähnliche Zustandsdichte  $\rho_0$  besitzen [127]. Dieser Unterschied stimmt mit theoretischen Vorhersagen aus Ref. [131] überein. Die entsprechenden

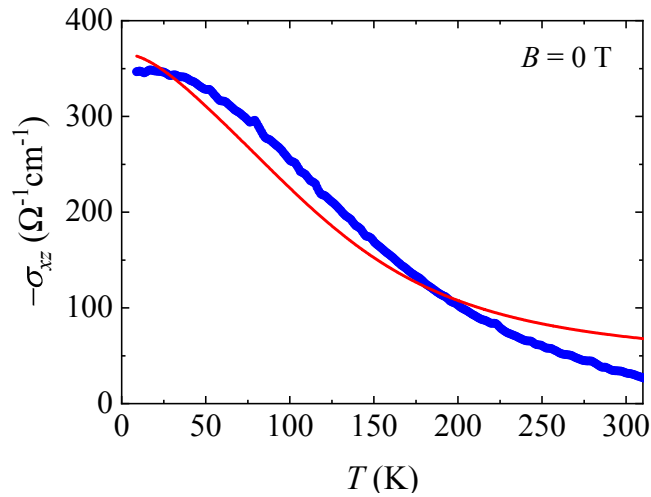


**Abbildung 4.19:** Berry-Krümmung  $\Omega^y$  (hier als  $\Omega_{xx}$  bezeichnet) entlang der  $k_z$ -Richtung integriert und farbkodiert dargestellt in Abhängigkeit von  $k_x$  und  $k_y$  für (a) Mn<sub>3</sub>Ge und (b) Mn<sub>3</sub>Sn. Im markierten Bereich befinden sich zwei Hotspots der Berry-Krümmung in Mn<sub>3</sub>Ge. (c) und (d) zeigen die jeweilige Banddispersion in Abhängigkeit von  $k_z$  inklusive der Berry-Krümmung im Bereich der Hotspots. Die Abbildung wurde aus Ref. [131] übernommen und zur Übersichtlichkeit leicht modifiziert.

Ergebnisse sind in Abbildung 4.19 dargestellt, in Mn<sub>3</sub>Ge ist deutlich ein sogenannter Hotspot der Berry-Krümmung in der Nähe der Fermi-Energie sichtbar.

Abbildung 4.18b zeigt  $\alpha_{xz}$  für Mn<sub>3,06</sub>Sn<sub>0,94</sub> und Mn<sub>3,09</sub>Sn<sub>0,91</sub> in Abhängigkeit von der Temperatur. Die Maxima der Daten befinden sich für beide Materialien bei höheren Temperaturen als in Mn<sub>3</sub>Ge (vgl. Abbildung 4.16e). Daraus lässt sich analog zur Argumentation in Abschnitt 4.3.2 qualitativ feststellen, dass die Weyl-Punkt-Energie in Mn<sub>3</sub>Sn wesentlich größer sein muss.

Die Ergebnisse der Anpassung mithilfe der Gleichungen 4.25 und 4.31 sind in Abbildung 4.18b für die Systeme Mn<sub>3,06</sub>Sn<sub>0,94</sub> und Mn<sub>3,09</sub>Sn<sub>0,91</sub> dargestellt. Aufgrund der stöchiometrischen Abweichung entstehen größere Bereiche, in denen sich die Anpassungsparameter für Mn<sub>3</sub>Sn bewegen können.  $C_\alpha = 0,004...0,010 \text{ V(K}\Omega\text{m)}^{-1}$  ist wie erwartet beinahe eine Größenordnung kleiner als in Mn<sub>3</sub>Ge. Für die Energie der Weyl-Punkte, die am nächsten am Fermi-Niveau liegen, ergibt sich ein Bereich von  $\mu_0 \approx 40...100 \text{ meV}$ . Wieder stimmt das Ergebnis der Anpassung gut mit Vorhersagen der Bandstrukturechnungen aus Ref. [127] überein, welche



**Abbildung 4.20:** Hall-Leitfähigkeit  $\sigma_{xz}$  in Abhängigkeit der Temperatur. Die Daten (blaue Punkte) wurden mithilfe der Anpassungsformeln 4.34 und 4.35 und der aus der Anpassung von  $\alpha_{xz}$  gewonnen Parameter  $\mu_0 = 6,6 \pm 0,7$  meV,  $E_S = 90 \pm 25$  meV und  $N_W = 17,8 \pm 2,2$  gefittet (rote Linie). Der verbleibende Parameter  $C_\sigma = -3,6 \pm 0,3$  ( $\Omega \text{ cm meV}$ ) $^{-1}$ .

einen Wert von 86 meV für die Energie der energetisch am niedrigsten liegenden Weyl-Punkte in  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  angeben.

### Anpassung der Hall-Effekt-Daten

Mithilfe einer analogen Vorgehensweise (vgl. Abschnitt 4.3.2) kann eine Anpassungsformel für die Temperaturabhängigkeit der anomalen Hall-Leitfähigkeit  $\sigma_{xz}$  hergeleitet werden. Dabei muss jedoch eine zusätzliche Näherung berücksichtigt werden um das Integral analytisch zu lösen, da  $\sigma_{xz}$  im Gegensatz zu  $\alpha_{xz}$  nicht nur von Zuständen in der Nähe der Fermi-Energie abhängt, sondern von allen besetzten Elektronenzuständen. Dieser Unterschied drückt sich für  $\sigma_{xz}$  in der Abhängigkeit der Fermi-Verteilung  $F(E)$  aus, während für  $\alpha_{xz}$  die Impuls-Zustände durch die Entropie-Dichte  $s(E)$  gewichtet werden (siehe Kapitel 2.2). Ausgehend vom Ausdruck

$$\sigma_{xz} = \frac{e^2}{\hbar} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Omega^y(\mathbf{k}) F(\epsilon_{\mathbf{k}}) \quad (4.33)$$

erhält man folgende Formel zur Anpassung:

$$\sigma_{xz} = C_\sigma k_B T [2 \ln(1 + e^{(E_S/2 - \mu)/k_B T}) - \ln(1 + e^{(-E_S/2 - \mu)/k_B T})]. \quad (4.34)$$

Dabei ist  $C_\sigma$  ein spezifischer Parameter für die Anpassung von  $\sigma_{xz}$ , während die Energie des Sattelpunkts  $E_S$  und das temperaturabhängige chemische Potenzial  $\mu(T)$  ebenfalls in der Anpassungsformel von  $\alpha_{xz}$  (Gleichung 4.25) vorkommen. Die Temperaturabhängigkeit von  $\mu$  wird hierbei wieder als

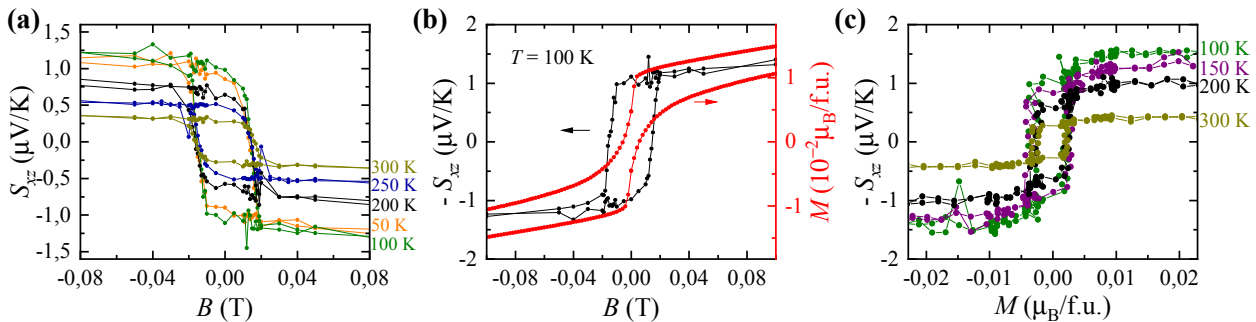
$$\mu(T) \approx \sqrt{\mu_0^2 + (0.162 \cdot N_W \cdot k_B T)^2} \quad (4.35)$$

(vgl. Gleichung 4.31 in Abschnitt 4.3.2) angenommen. Damit lässt sich also der Temperaturverlauf von  $\sigma_{xz}$  mittels der Parameter  $E_S$ ,  $\mu_0$  und  $N_W$  anpassen. Um die erhaltenen Ergebnisse aus der Anpassung von  $\alpha_{xz}$  zu überprüfen, wurden die in Abschnitt 4.3.3 erhaltenen Parameter ( $\mu_0 = 6,6 \pm 0,7$  meV,  $E_S = 90 \pm 25$  meV und  $N_W = 17,8 \pm 2,2$ ) innerhalb ihrer Fehlerintervalle verwendet, um  $\sigma_{xz}$  zu fitten. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.20 dargestellt. Der verbleibende Parameter  $C_\sigma$  ergibt sich als  $C_\sigma = -3,6 \pm 0,3$  ( $\Omega$  cm meV)<sup>-1</sup>. Die Anpassung funktioniert für  $\sigma_{xz}$  weniger gut als für  $\alpha_{xz}$ , was vermutlich auf die zusätzlich benötigte Näherung zur Herleitung von Gleichung 4.34 zurückzuführen ist.

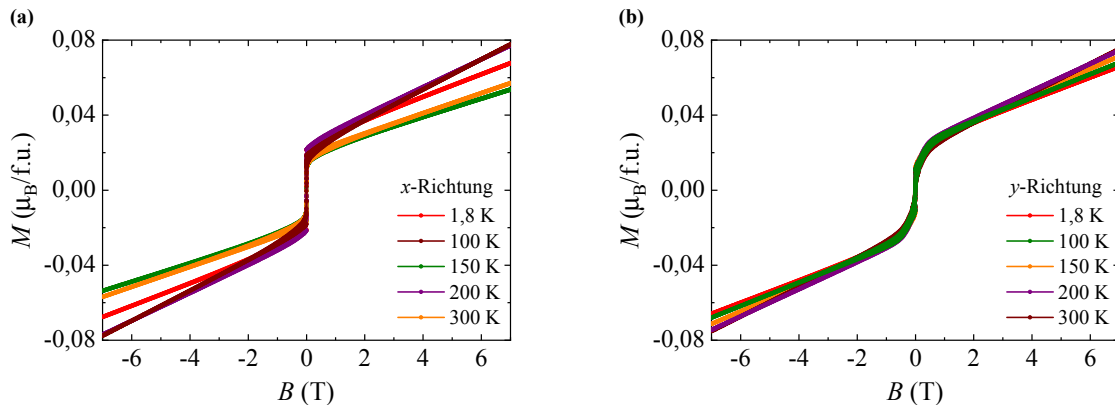
### Nernst-Signal bei niedrigen Magnetfeldern

Wie bereits in Kapitel 4.3.2 erwähnt, weisen die Nernst-Signale  $S_{xz}$  und  $S_{yz}$  im Magnetfeld-Bereich unterhalb von  $B = 0,02$  T ein ausgeprägtes hysteretisches Verhalten auf. Abbildung 4.21a zeigt  $S_{xz}$  in einem Feldbereich von  $-0,08$  T bis  $0,08$  T für ausgewählte Temperaturen. Der rechteckige Hysterese-Kreislauf tritt nahezu unverändert für alle gemessenen Temperaturen von 5 K bis Raumtemperatur auf und besitzt eine maximale Ausdehnung von  $\Delta S_{xz} \approx 2$   $\mu$ V/K bei 100 K. Mn<sub>3</sub>Sn zeigt ein ähnliches hysteretisches Verhalten, jedoch beträgt die maximale Ausdehnung des Kreislaufs dort nur  $\Delta S_{xz} \approx 0,7$   $\mu$ V/K [116]. Durch eine Änderung des Magnetfeldes um ungefähr 50 mT kann das Nernst-Signal in Mn<sub>3</sub>Ge somit um rund 2  $\mu$ V/K geschaltet werden. Diese Eigenschaft in den nicht-kollinearen Antiferromagneten Mn<sub>3</sub>Ge und Mn<sub>3</sub>Sn prädestiniert diese Materialien für Anwendungen im Bereich der Spintronik [114, 120, 133–135] oder zur Energiegewinnung als thermoelektrische Komponenten [116, 136].

Eine mögliche Ursache des Hysterese-Verhaltens des anomalen Nernst-Effekts kann die (trotz der antiferromagnetischen Spinstruktur) verbleibende Restmagnetisierung sein. Um einen Vergleich zu erstellen, wurde die Magnetisierung entlang der  $x$ - und  $y$ -Richtung als Funktion der Temperatur und des Magnetfeldes mithilfe eines SQUID-VSM von Quantum Design gemessen. Die Messungen wurden von Francesco Scaravaggi am IFW Dresden durchgeführt. Abbildung



**Abbildung 4.21:** Verhalten von  $S_{xy}$  und  $M$  bei niedrigen Magnetfeldern aus Ref. [112]. (a) Vergrößerung des Niedrigfeld-Bereichs von  $S_{xz}$  in Abhängigkeit von  $B$  für ausgewählte Temperaturen. (b) Vergleich der Hysterese-Kreisläufe von  $S_{xz}(B)$  und  $M(B)$  für  $T = 100$  K. (c)  $S_{xz}$  in Abhängigkeit der Magnetisierung  $M$ . Eine direkte Abhängigkeit kann durch den konstanten Verlauf ausgeschlossen werden.



**Abbildung 4.22:** Magnetisierung von  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  in der (a)  $x$ -Richtung und (b)  $y$ -Richtung aus Ref. [112].

4.22a und 4.22b zeigen jeweils die Magnetisierungen in  $x$ - und  $y$ -Richtung als Funktion des Magnetfeldes. Trotz eines Sprungs der Magnetisierung bei niedrigen Magnetfeldern besteht keine Abhängigkeit des Nernst-Signals von selbiger, wie in Abbildung 4.21b zu sehen ist. Das Schließen des Hysteresis-Kreislaufs geschieht für  $M$  bei wesentlich höheren Feldern und steigt dann weiterhin linear an, auch wird das rechteckige Verhalten nicht reproduziert. In Abbildung 4.21c ist das Nernst-Signal in Abhängigkeit der Magnetisierung für ausgewählte Temperaturen aufgetragen. Es ist leicht erkennbar, dass ein Umschalten der Magnetisierung nicht sofort eine Änderung von  $S_{xz}$  nach sich zieht, vielmehr zeigt sich das Nernst-Signal nach einem Sprung komplett unabhängig von  $M$ .

## Fazit

Das hysteretische Verhalten des Nernst-Signals bei kleinen Magnetfeldern stimmt nachweislich nicht mit dem Verhalten der Magnetisierung überein, wodurch eine solche Abhängigkeit ausgeschlossen werden kann. Vielmehr zeigt diese Auswertung, dass ein anomaler Nernst-Effekt ein eindeutiger Hinweis auf die Präsenz von Weyl-Punkten und einer endlichen Berry-Krümmung in der Nähe der Fermi-Energie ist. Die Temperaturabhängigkeit des aus den Transportmessungen gewonnenen anomalen transversalen Peltier-Koeffizienten kann mithilfe eines minimalen theoretischen Modells angepasst werden, wodurch sich essentielle Parameter der Bandstruktur in der Nähe der Weyl-Punkte extrahieren lassen. Dazu zählt der wichtige Parameter  $\mu_0$ , der Abstand der Weyl-Punkte zur Fermi-Energie, welcher entscheidend für die Auswirkung der Weyl-Punkte auf die Eigenschaften des Festkörpers ist. Dieser sowie der Abstand der Weyl-Punkte im  $\mathbf{k}$ -Raum, deren Sattelpunktenergie und die experimentell relevante Stärke der Berry-Krümmung an der Fermi-Energie wurden erfolgreich aus Nernst-Messungen an  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  extrahiert und stimmen sehr gut mit Bandstrukturrechnungen überein. Im Rahmen dieses theoretischen Modells lässt sich mithilfe der Parameter auch die Temperaturabhängigkeit der Hall-Leitfähigkeit hinreichend nachbilden. Eine zusätzliche Analyse von Nernst-Messungen aus

der Literatur an Mn<sub>3</sub>Sn und die daraus erhaltenen entsprechenden Parameter lassen sich mit denen aus Mn<sub>3</sub>Ge vergleichen. Auch für Mn<sub>3</sub>Sn stimmen der Abstand der Weyl-Punkte zur Fermi-Energie, deren Separation im  $\mathbf{k}$ -Raum sowie die Sattelpunktenergie sehr gut mit Vorhersagen der Bandstruktur überein. Auch der Vergleich der experimentell relevanten Stärke der Berry-Krümmung an der Fermi-Energie zwischen Mn<sub>3</sub>Ge und Mn<sub>3</sub>Sn bestätigt entsprechende Rechnungen.

## 4.4 Diskussion

In den vorangehenden Abschnitten wurden ausführlich Untersuchungen des Nernst-Effekts in verschiedenen Weyl-Halbmatal-Kandidaten beschrieben und ausgewertet. Trotz der theoretisch vorhergesagten Weyl-Punkte nahe der Fermi-Fläche und der daraus resultierenden endlichen Berry-Krümmung unterscheiden sich  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  und  $\text{TaAs}/\text{TaP}$  grundsätzlich aufgrund der gebrochenen Symmetrien voneinander. Im nicht-kollinearen Antiferromagneten  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  wird die Zeitumkehr-Symmetrie gebrochen (vgl. Abschnitt 4.3), während in  $\text{TaAs}$  und  $\text{TaP}$  eine gebrochene Inversionssymmetrie vorherrscht (vgl. Abschnitt 4.2). Dennoch soll an dieser Stelle ein qualitativer Vergleich beider Ergebnisse aufgeführt und diskutiert werden.

Der wohl wesentlichste Unterschied der Nernst-Signale in beiden Fällen ist das Auftreten eines normalen Beitrags zum Nernst-Effekt. Während in  $\text{TaAs}$  und  $\text{TaP}$  der anomale Beitrag nur für manche Temperaturen als Sättigung nach einem anfänglichen Anstieg in Abhängigkeit des Magnetfeldes auftritt (vgl. Abbildung 4.6), zeigt sich in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  für alle gemessenen Temperaturen ein sprunghafter Anstieg der Nernst-Signale  $S_{xz}$  und  $S_{yz}$  nahe  $B = 0$  T auf einen Wert, der, ohne erkennbaren normalen Beitrag, bis  $B = 15$  T konstant bleibt (vgl. Abbildung 4.16). Dieses durchgehend dominierende, anomale Verhalten wurde in Weyl-Halbmatal-Kandidaten bis jetzt, abgesehen von  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  und  $\text{Mn}_3\text{Sn}$ , nur in ferromagnetischen Materialien beobachtet [137, 138], jedoch auch z.B. für die ferrimagnetische Verbindung  $\text{Ti}_2\text{MnX}$  (mit  $X = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}$ ) vorhergesagt [139]. Das Auftreten eines dominierenden anomalen Nernst-Effekts ist notwendig, um mithilfe der in Abschnitt 4.3.2 hergeleiteten Gleichung 4.25 eine Anpassung der Temperaturabhängigkeit der Daten durchführen zu können. Die daraus resultierenden Informationen über die Bandstruktur, insbesondere die Lage der Weyl-Punkte relativ zur Fermi-Energie, können somit mit theoretischen Vorhersagen verglichen werden.

Der normale Nernst-Effekt zeichnet sich durch seine zunächst lineare Abhängigkeit vom Magnetfeld aus, welche sich durch verschiedene Näherungen aus der semiklassischen Transporttheorie ergibt. Um ein großes normales Nernst-Signal zu erhalten, muss in einem Leiter eine große effektive Mobilität der Ladungsträger oder eine Kompensation von Elektronen und Löchern vorherrschen [11] (vgl. Kapitel 2.1.4). Treffen diese Eigenschaften zu, so ist auch der Magnet-Widerstand groß, wie man sich anhand einer Zweiband-Beschreibung verdeutlichen kann (vgl. Kapitel 2.1.2, Gleichung 2.74):

$$\rho(B) = \frac{\rho_1 \rho_2 (\rho_1 + \rho_2) + (\rho_1 R_1^2 + \rho_2 R_2^2) B^2}{(\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_1 + R_2)^2 B^2}. \quad (4.36)$$

$\rho_1$  und  $\rho_2$  sind die Widerstände,  $R_1$  und  $R_2$  die Hall-Konstanten des jeweiligen Bandes. Im Falle von kompensierter Elektronen- und Löcherleitung ist  $\rho_1 = \rho_2 = \rho$  und  $R_1 = -R_2 = R$ ,

wodurch sich für den Magnetwiderstand ergibt (vgl. Gleichung 2.75):

$$\rho(B) = \frac{\rho}{2} + \frac{1}{2} \frac{R^2}{\rho} B^2. \quad (4.37)$$

Eine große Ladungsträgermobilität ( $\rho$  klein) sollte bei Kompensation also zu einer starken Abhängigkeit des Widerstands vom Magnetfeld führen [7]. Da in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  keinerlei Abhängigkeit  $\rho(B)$  gemessen wurde (siehe Abschnitt 4.3.1), kann man von einem unkompensierten System mit geringer effektiver Mobilität ausgehen, in welchem kein nennenswertes normales Nernst-Signal zu erwarten ist.

Im Gegensatz zu  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  sind TaP und TaAs wahre Halbmetalle und zeigen einen großen Magnet-Widerstand, was auf hohe effektive Mobilitäten zurückzuführen ist [104, 105]. Dadurch entsteht in diesen Systemen ein großer normaler Nernst-Effekt, welcher erst für höhere Magnetfelder verschwindet und durch ein anomales Nernst-Signal dominiert wird. Dieses Verhalten kann qualitativ folgendermaßen interpretiert werden: Aufgrund der hohen effektiven Ladungsträgermobilität besteht ein großes normales Nernst-Signal, welches jedoch aufgrund der Proportionalität zu  $\mu_e B / (1 + (\mu_e B)^2)$  mit steigendem Magnetfeld wieder abnimmt (vgl. Gleichung 4.4). Das anomale Nernst-Signal ist präsent, ändert sich jedoch mit Änderung des Magnetfeldes durch die Verschiebung der Weyl-Punkte und der damit einhergehenden Änderung des chemischen Potentials (vgl. Abbildung 4.9).

Somit ist diese Kombination aus einem nicht-kompensierten Metall mit einem verschwindend geringem normalen Nernst-Signal und einem großen anomalen Nernst-Signal, wie sie in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  oder  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  vorliegt, am geeignetsten zur Anwendung der in Abschnitt 4.3.2 hergeleiteten Anpassungsformel. Im Vergleich mit Bandstrukturechnungen ist hier der anomale Nernst-Effekt ein Beweis für die Existenz von Weyl-Punkten und einer großen Berry-Krümmung nahe der Fermi-Energie. Doch auch in Materialien mit einem vorhandenem normalen Nernst-Signal, wie es in TaP und TaAs der Fall ist, gibt der anomale Nernst-Effekt Hinweise auf das Verhalten der Bandstruktur in der Nähe der Fermi-Energie, insbesondere auf die Existenz potenzieller Weyl-Punkte. Der anomale Nernst-Effekt reiht sich also neben der Detektion von Fermi-Bögen und der chiralen Anomalie ein in die Messmethoden zur Identifizierung potenzieller Weyl-Halbmetalle.

Eine weitere Konsequenz aus dem für bestimmte Messkonfigurationen komplett anomalen Verhalten des Nernst-Signals in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  zusammen mit dem hysteretischen Verlauf ist seine potenzielle Anwendung in verschiedenen technologischen Bereichen. Als thermoelektrisches Material könnte zum Beispiel eine Spannung aus dem Temperaturgradienten heißer Oberflächen gewonnen werden [116]. Der Vorteil gegenüber auf dem Seebeck-Effekt basierender thermoelektrischer Materialien liegt in einer platzsparenden Bauweise, da der Temperaturgradient senkrecht zur abgenommenen Spannung fließen muss und die Spannung somit parallel zur heißen Oberfläche abgenommen werden kann [136]. Außerdem bietet der rechteckige



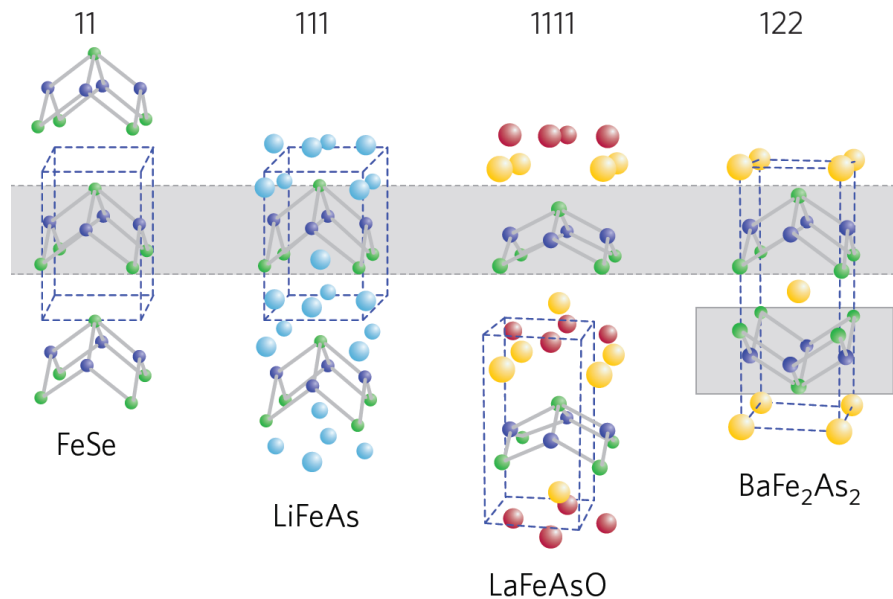
Hysteresis-Verlauf des Nernst-Signals (vgl. Abbildung 4.21) die Möglichkeit, das Signal um einen Betrag von  $1\mu\text{V/K}$  bei Raumtemperatur unter Anlegung eines winzigen Magnetfeldes von 20 mT zu schalten. Diese Funktion könnte Anwendungen im Gebiet der Spintronik ermöglichen [114, 120, 133–135, 140]. Außerdem zeigen Messungen in Abhängigkeit des hydrostatischen Drucks, dass sich der anomale Hall-Effekt in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  beliebig einstellen und zum Beispiel bei Raumtemperatur invertieren lässt [141]. Da dieser Effekt direkt auf die Berry-Krümmung zurückzuführen ist, sollte ein ähnliches Verhalten auch im anomalen Nernst-Effekt sichtbar sein.

# 5 Eisenbasierte Supraleiter

## 5.1 Einleitung

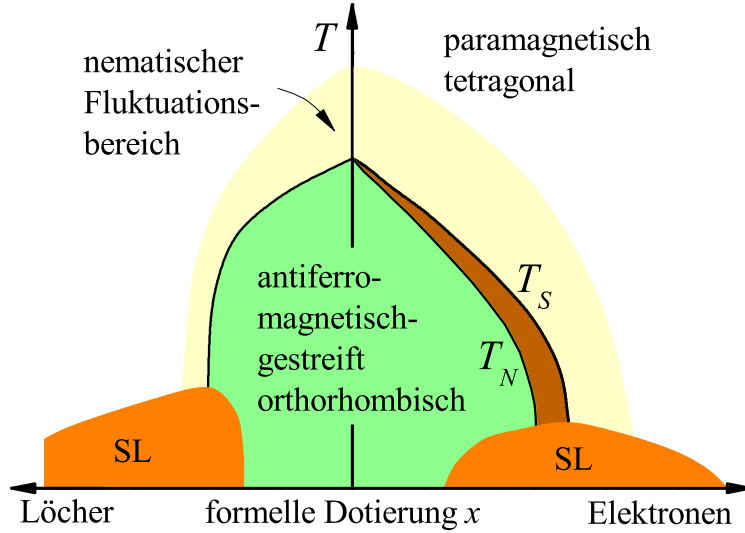
Im Jahr 2008 wurde das Gebiet der unkonventionellen Supraleiter um eine weitere Materialklasse erweitert. Mit der Entdeckung der Supraleitung ( $T_C = 26$  K) in  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  [143] rückten die eisenbasierten Supraleiter ins Zentrum der Hochtemperatursupraleitungsforschung. In den folgenden Jahren stieg die beobachtete Sprungtemperatur auf bis zu 56 K in  $\text{Gd}_{1-x}\text{Th}_x\text{FeAsO}$  [144] bzw. in  $\text{Sr}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeAsF}$  [145] und später auf über 100 K in FeSe-Monolagen an [146]. Trotz ihrer im Vergleich zu den Kuprat-Supraleitern im Allgemeinen niedrigeren Sprungtemperatur, überraschte die Koexistenz von Magnetismus und Hochtemperatursupraleitung in dieser Materialklasse. Anhand ihrer Kristallstruktur werden die eisenbasierten Supraleiter in verschiedene Familien unterteilt. Die entsprechenden Strukturen der wichtigsten Familien sind in Abbildung 5.1 dargestellt. Die Kristallstruktur der eisenbasierten Supraleiter ist geschichtet und gekennzeichnet von Ebenen, welche aus Fe- und As-Atomen (bzw. Se, Te oder P) bestehen. Die Fe-Atome bilden ein quadratisches Gitter, wobei sich im Zentrum der Quadrate jeweils abwechselnd oberhalb und unterhalb der Ebene As-Atome befinden. Diese FeAs-Ebenen sind somit aus  $\text{FeAs}_4$ -Tetraedern aufgebaut und durch Metall- bzw. Metalloxid-Schichten voneinander getrennt. Letztere teilen die Materialien in die entsprechenden Familien ein, welche nach der Stöchiometrie der Verbindungen benannt werden, so sind die wichtigsten Familien die 11- (FeSe), 111- ( $\text{NaFeAs}$ ), 1111- ( $\text{LaFeAsO}$ ) und 122-Familie ( $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ ) (vgl. Abbildung 5.1). Von den hier aufgelisteten Verbindungen besitzen einzelne Vertreter der 11- (z.B. FeSe) und 111-Familie (z.B.  $\text{NaFeAs}$ ) einen supraleitenden Grundzustand, im Allgemeinen ist dies jedoch nicht der Fall. Oft weisen eisenbasierte Supraleiter bei hohen Temperaturen eine tetragonale Kristallstruktur und Paramagnetismus auf und besitzen einen orthorhombischen und antiferromagnetischen Grundzustand (in Form einer SDW). Dieser SDW-Grundzustand wird durch eine ferromagnetische Kopplung der Spins in der Fe-Ebene entlang einer Richtung und einer antiferromagnetischen Kopplung senkrecht dazu charakterisiert. Durch Druck oder Dotierung an verschiedenen Gitterplätzen wird in den eisenbasierten Supraleitern im Allgemeinen die magnetisch geordnete Phase unterdrückt und eine supraleitende Phase entsteht.

Da der Fokus dieser Arbeit auf der Untersuchung von Vertretern der 122- und 1111-Familie liegt, sollen im Folgenden deren Eigenschaften unter Dotierung anhand von Phasendiagram-



**Abbildung 5.1:** Kristallstrukturen ausgewählter Familien eisenbasierter Supraleiter aus Ref. [142]. Allen gemein sind die Eisenpniktid-Ebenen, bestehend aus einem quadratischen Fe-Gitter mit As-Atomen (bzw. Se, Te oder P), welche sich jeweils über und unter der Fe-Ebene auf den projizierten Zwischengitterplätzen befinden und gemeinsam FeAs<sub>4</sub>-Tetraeder bilden. Die  $a$ - und  $b$ -Richtungen beschreiben die Verbindungen der Fe-Atome innerhalb der FeAs-Ebene, die  $c$ -Richtung wird senkrecht dazu definiert.

men erklärt werden. Exemplarisch ist in Abbildung 5.2 ein schematisches Phasendiagramm von BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> unter Elektronen- und Lochdotierung dargestellt. Beide Seiten lassen sich in einen optimal dotierten ( $T_c(x_{opt})$  maximal), einen unterdotierten ( $x < x_{opt}$ ) und einen überdotierten ( $x > x_{opt}$ ) Bereich unterteilen. Im undotierten Zustand besitzt BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> eine ThCr<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>-Kristallstruktur [147] und befindet sich oberhalb von  $T_S = 138$  K in einer tetragonalen Phase (Symmetriegruppe  $I4/mmm$ ). Bei  $T_S$  kommt es zu einem strukturellen Phasenübergang erster Ordnung in eine orthorhombische Symmetrie ( $Fmmm$ ) [148, 149]. Die magnetische Struktur durchläuft ebenfalls einen Phasenübergang erster Ordnung bei  $T_N = T_S$  und geht von einem paramagnetischen in einen antiferromagnetischen SDW-Grundzustand über [147, 150]. Dabei richtet sich die SDW entlang der längeren Fe-Fe-Verbindung in der orthorhombischen Phase aus [148]. Eine geringe Elektronendotierung (rechte Seite des Phasendiagramms in Abbildung 5.2) führt zu einer Absenkung und Aufteilung von  $T_S$  und  $T_N$ , wobei  $T_N$  bei tieferen Temperaturen liegt. Im Falle von Lochdotierung fallen die Übergangstemperaturen ebenfalls ab, jedoch wurde keine Trennung von  $T_S$  und  $T_N$  beobachtet (vgl. linke Seite des Phasendiagramms in Abbildung 5.2). Sobald die magnetische Phase weitgehend unterdrückt ist, stellt sich mit steigender (Elektronen- und Loch-) Dotierung ein endliches  $T_c$  ein und es existiert ein supraleitender Grundzustand. Dabei scheint  $T_c$  im Bereich des Verschwindens von  $T_N$  am größten zu sein. In K-dotiertem BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> (entspricht formeller Lochdotierung) wurde dabei eine Phasenseparation von Magnetismus und Supraleitung beobachtet, während in Co-dotiertem BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> eine Koexistenz der beiden Phasen auftritt [151]. Im Elektron-überdotierten Bereich verschwindet

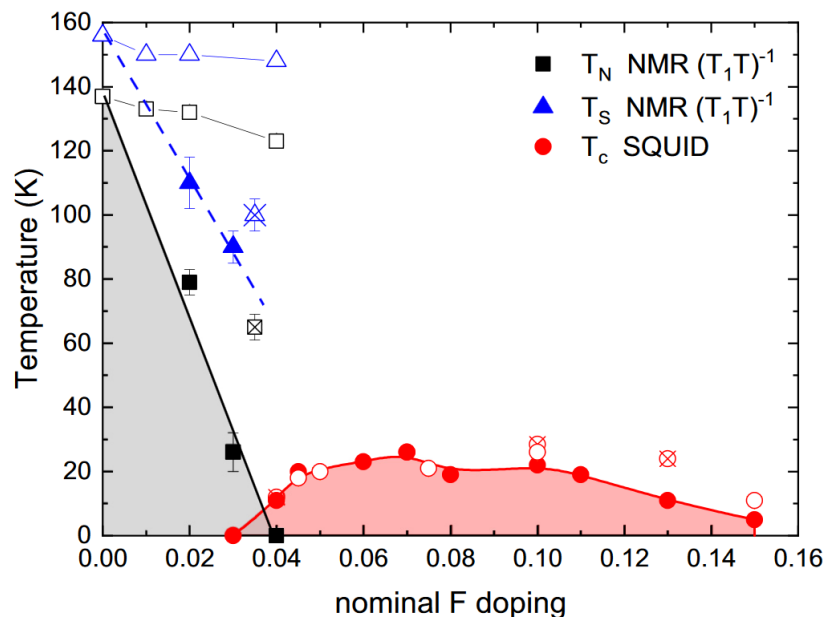


**Abbildung 5.2:** Schematisches Phasendiagramm unter Elektronen- und Lochdotierung der 122-Familie aus Ref. [73].

der supraleitende Zustand für Substitution mit Co oder Rh bei  $x = 0,15 - 0,2$  [152] wieder, während er im Loch-dotierten Bereich bei vollständiger Substitution mit K ( $\text{KFe}_2\text{As}_2$ ) noch immer besteht [153, 154].

In  $\text{LaFeAsO}$ , einem Vertreter der 1111-Familie, zeigt sich bereits im undotierten Zustand eine Trennung von  $T_S$  und  $T_N$ , wobei sowohl struktureller als auch magnetischer Phasenübergang zweiter Ordnung sind [163]. Ein entsprechendes Phasendiagramm aus Ref. [155] von F-dotiertem  $\text{LaFeAsO}$  ist in Abbildung 5.3 dargestellt. Es weist im unterdotierten Bereich starke Unterschiede zu früheren veröffentlichten Phasendiagrammen [156] auf, deren Übergänge als offene Symbole ebenfalls in Abbildung 5.3 gezeigt werden. Bestimmt man die Dotierkonzentrationen jedoch mithilfe der Kernquadrupolresonanz-Spektroskopie (NQR-Spektroskopie), zeigen sowohl ältere als auch neuere Daten den gleichen Verlauf der Übergangstemperaturen [155]. Die undotierte Verbindung geht von einem tetragonalen und paramagnetischen Zustand bei hohen Temperaturen über in einen antiferromagnetischen und orthorhombischen Grundzustand (Raumgruppe  $Cmma$  [164]). Mit steigender Dotierung sinken  $T_S$  und  $T_N$  linear ab und  $T_N$  verschwindet bei  $x \approx 4\%$ . Bei  $x \approx 3\%$  kann bereits Supraleitung nachgewiesen werden. Dabei koexistieren die magnetisch geordnete und die supraleitende Phase mikroskopisch nebeneinander, wobei sich die Supraleitung in Bereichen der Größe von wenigen nm bildet, in denen lokal eine höhere Dotierung vorherrscht [155]. Dieses Verhalten scheint unter den Vertretern der 1111-Familie universell zu sein. Auch an  $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  wurde mittels Myon-Spektroskopie [165] sowie an  $\text{CeFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  mittels Myon-Spin-Relaxation [166] eine solche mikroskopische Phasenkoexistenz gefunden.

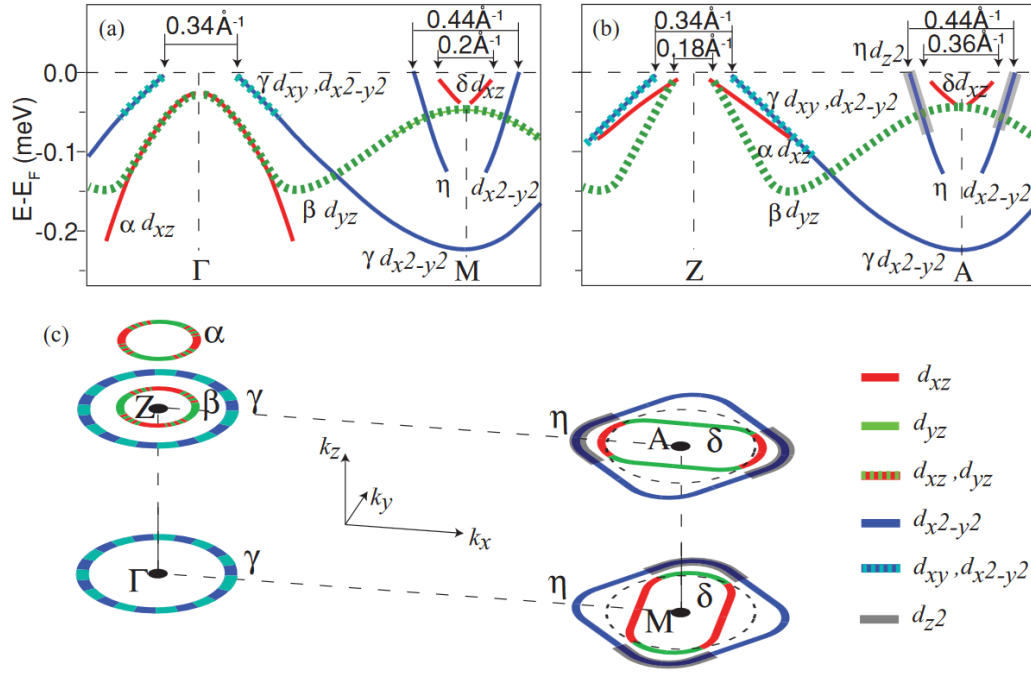
Die elektronische Struktur der eisenbasierten Supraleiter wird durch elektronen- und lochar-tige Fermi-Taschen bestimmt, welche aus mehreren Bändern gebildet werden [168–174]. Diese bestehen aus den  $3d$ -Orbitalen des Übergangsmetalls und aus Hybridisierung mit den Liganden



**Abbildung 5.3:** Phasendiagramm von LaFeAsO<sub>1-x</sub>F<sub>x</sub> als Vertreter der 1111-Familie aus Ref. [155], welches mittels Messungen der Kernspinresonanzspektroskopie (NMR-Spektroskopie), sowie der Magnetisierung in einem SQUID-Magnetometer (supraleitende Quanteninterferenzeinheit) gewonnen wurde. Entsprechende Ergebnisse aus früheren Messungen der gleichen Größen an unterschiedlichen Probenreihen aus Ref. [156] sind als offene Symbole dargestellt. Offene und durchkreuzte Symbole stehen für Messungen aus verschiedenen Referenzen ([157–162]), welche aufgrund falscher Werte der Dotierung bzw. einer As-Reduzierung nicht ins Phasendiagramm passen [155].

[175–178]. Aufgrund der zweidimensionalen Schichtstruktur ist die Fermi-Fläche zylinderartig (die Struktur in  $k_z$ -Richtung hängt von den Zwischenschichten und somit von der jeweiligen Familie ab [175]) und besteht im Allgemeinen aus mindestens zwei lochartigen Zylindern am  $\Gamma$ -Punkt und zwei elektronenartigen am Rand der Brillouin-Zone. Abbildung 5.4 zeigt, am Beispiel von leicht mit Co überdotiertem BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, den orbitalen Charakter der Fermi-Taschen aus Ref. [167], welche mithilfe von ARPES-Messungen bestimmt wurden. Der orbitale Charakter gibt an, welches Orbital, in Abhängigkeit von  $\mathbf{k}$ , das größte spektrale Gewicht zum jeweiligen Band beiträgt. Es zeigt sich, dass, trotz der allgemeinen zylindrischen Form der Fermi-Fläche, einzelne Fermi-Taschen je nach Richtung einen unterschiedlichen orbitalen Charakter aufweisen können und dieser außerdem deutlich von  $k_z$  abhängen kann.

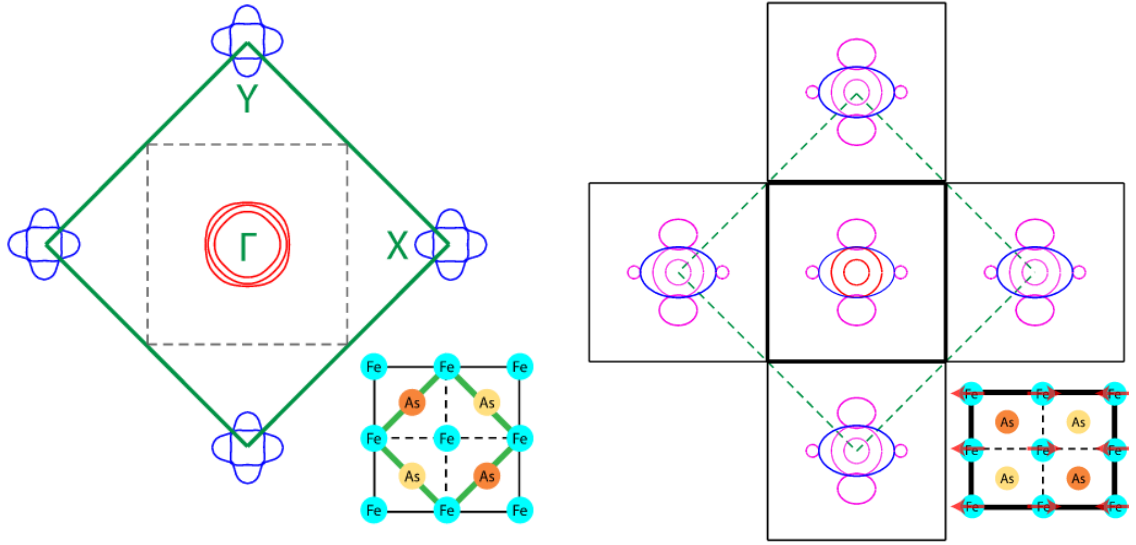
Eine weitere schematische Darstellung der Fermi-Fläche in der tetragonalen Phase ist am Beispiel von BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> in Abbildung 5.5a gezeigt. Beim Übergang in die magnetisch geordnete SDW-Phase verdoppelt sich die kleinste periodische Einheit im Ortsraum aufgrund der magnetischen Ordnung (vgl. Inset in Abbildung 5.5b) und es kommt somit zu einer Halbierung der Brillouin-Zone und folglich zu einer Rückfaltung der Elektronenbänder. Die resultierende Fermi-Fläche ist in Abbildung 5.5b schematisch dargestellt. Die exakte Rückfaltung der elektronenartigen auf die lochartigen Bereiche der Fermi-Flächen ist dabei kein Zufall, son-



**Abbildung 5.4:** Orbitaler Charakter der Fermi-Flächen von  $\text{BaFe}_{1.85}\text{Co}_{0.15}\text{As}_2$  aus Ref. [167]. (a) und (b) zeigen die Bandstrukturen und deren orbitalen Charakter nahe der Fermi-Energie zwischen dem Mittel- und Randpunkt zweier Schnitte (bei unterschiedlichem  $k_z$ ) durch die Brillouin-Zone. (c) verdeutlicht diese Darstellung in Form zweier zweidimensionaler Fermi-Flächen bei unterschiedlichem  $k_z$ . Man sieht deutlich, dass der orbitale Charakter der Fermi-Fläche in einer bestimmten Richtung in der  $k_x$ - $k_y$ -Ebene stark von  $k_z$  abhängt, während die Formen der Fermi-Taschen nahezu gleich bleiben.

dern wird oft als Grund für die Instabilität der elektronischen Struktur in der tetragonalen Phase angegeben. Aufgrund der ähnlichen zylinderartigen Form lassen sich die jeweiligen Bereiche mit einem Nesting-Vektor ineinander überführen. Dieser Vektor entspricht genau dem Ordnungsvektor der magnetischen Struktur in der SDW-Phase [168, 177]. Außerdem zeigen zahlreiche Modellrechnungen, dass innerhalb der SDW-Phase robuste Band-Kreuzungen nahe der Fermi-Energie entstehen können, welche die Dispersion von Dirac-Punkten aufweisen [179–183], und somit erheblichen Einfluss auf die Transportkoeffizienten haben können.

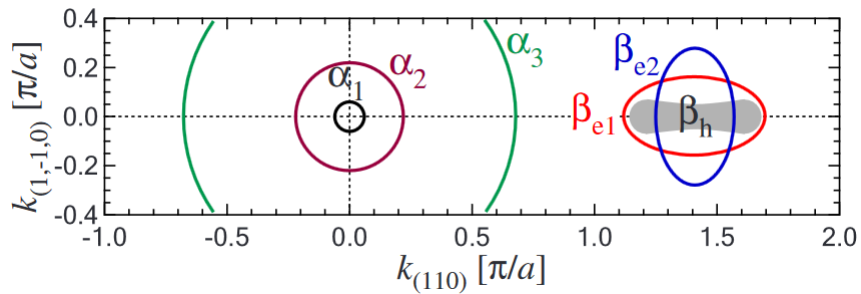
Eine ähnliche Fermi-Fläche existiert in  $\text{LaFeAsO}$  [171–174]. Am  $\Gamma$ -Punkt befinden sich drei lochartige Zylinder, und am  $M$ -Punkt zwei elektronenartige, wobei sich ein weiteres lochartiges Band knapp unterhalb der Fermi-Energie am  $M$ -Punkt befindet, wie in Abbildung 5.6 dargestellt ist.



(a) Zweidimensionale Projektion der Fermi-Fläche von  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  in der tetragonalen Phase aus Ref. [170]. Im Inset ist die Kristallstruktur in der FeAs-Ebene dargestellt. Die unterschiedliche Färbung der As-Atome deutet deren Verschiebung über bzw. unter der Ebene an.

(b) Fermi-Fläche von  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  aus Ref. [170] in der SDW-Phase. Im Inset ist Ausrichtung der magnetischen Momente der Fe-Atome dargestellt.

**Abbildung 5.5:** Fermi-Fläche von  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ . Die elektronartigen Teile der Fermi-Fläche sind blau, die lochartigen rot dargestellt. Die Grafiken stammen aus Ref. [170] und wurden aus ARPES-Daten gewonnen.



**Abbildung 5.6:** Schnitt durch die Fermi-Fläche von  $\text{LaFeAsO}$  aus ARPES-Daten aus Ref. [174]. Am  $\Gamma$ -Punkt befinden sich die lochartigen Fermi-Taschen  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  und  $\alpha_3$ . Am  $M$ -Punkt treten zwei elektronenartige Fermi-Taschen  $\beta_1$  und  $\beta_2$  auf. Außerdem wurde eine weitere lochartige Tasche ( $\beta_h$ ) nahe der Fermi-Energie am  $M$ -Punkt gemessen.

## 5.2 Nematische Ordnung

Eine weitere Phase, welche im Phasendiagramm unterschiedlicher Familien eisenbasierter Supraleiter auftreten kann, erstreckt sich zwischen dem strukturellen Phasenübergang bei  $T_S$  und dem magnetischen Phasenübergang bei  $T_N$ . Aufgrund des Übergangs von einem tetragonalen zu einem orthorhombischen Zustand wird durch das Gitter die  $C_4$ -Rotationssymmetrie (Invarianz unter Drehung von  $90^\circ$ ) gebrochen und geht in eine  $C_2$ -Rotationssymmetrie (Invarianz unter Drehung von  $180^\circ$ ) über. Dabei kommt es zum Beispiel in undotiertem  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  zu einer Anisotropie der Gitterparameter von  $(a - b)/(a + b) = 0,36 \%$  [147]. Diese Phase folgt in der 122-Familie mit steigender Dotierung dem Verlauf der SDW-Phase und verschwindet im Bereich optimaler Dotierung (vgl. braune Fläche in Abbildung 5.2).

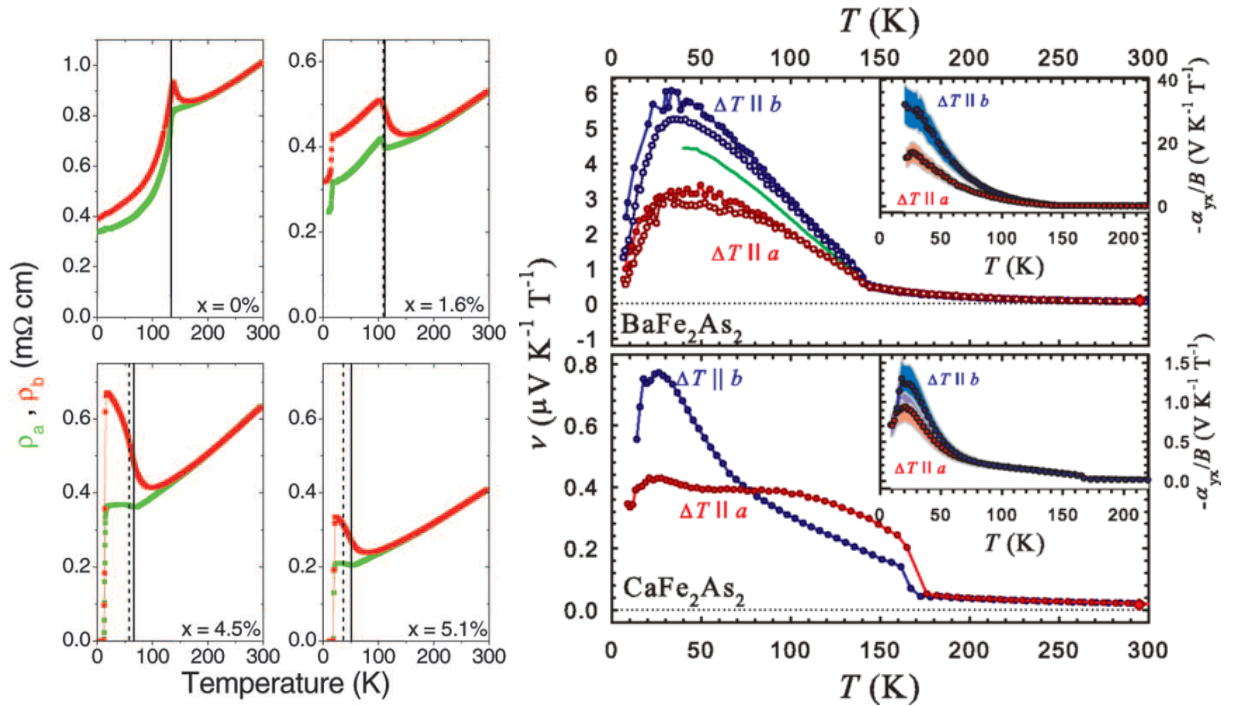
Da die Symmetriebrechung des Gitters in Domänen auftritt, welche sich unterhalb von  $T_S$  zufällig anordnen (sogenannte „verzwillingte“ Phase), sind genaue Aussagen über den Einfluss der Anisotropie kompliziert. Deshalb wird für exakte Messungen entlang der  $a$ - und  $b$ -Richtung ein „entzwillinger“ Kristall benötigt, also ein System, in dem die Domänen makroskopisch aneinander ausgerichtet werden. Chu *et al.* realisierten dies durch die von einem Piezo-Kristall induzierte Dehnungskraft und maßen den elektrischen Widerstand in  $a$ - und  $b$ -Richtung in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  für verschiedene Dotierstufen [184]. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.7a dargestellt. Die Anisotropie des elektrischen Widerstands erreicht Werte von bis zu 2 und zeigt außerdem, im Gegensatz zur stetig abnehmenden Anisotropie der Gitterparameter, eine nicht-monotone Abhängigkeit von der Dotierung [184]. Ähnliche starke Anisotropien konnten in diversen anderen Vertretern der eisenbasierten Supraleiter im spezifischen Widerstand [186–188], im Seebeck-Koeffizienten [185, 188] sowie im Nernst-Koeffizienten nachgewiesen werden (vgl. Abbildung 5.7b).

Eine weitere Symmetriebrechung des Systems erfolgt in der orbitalen Struktur, wodurch die Rotationssymmetrie auf der Fermi-Fläche unterhalb von  $T_S$  gebrochen wird [170]. Dabei kommt es zu einer Absenkung bzw. Anhebung der Orbitalenergien der  $d_{xz}$ - bzw.  $d_{yz}$ -Fe-Orbitale (schematisch veranschaulicht in Abbildung 5.8a) und einer damit verbundenen Verkleinerung bzw. Vergrößerung der Elektronen-Taschen am Rand der Brillouin-Zone. Abbildung 5.8b zeigt die Ergebnisse entsprechender ARPES-Messungen an  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  aus Ref. [170].

Auch das magnetische System zweist in der Nähe von  $T_S$  eine  $C_4$ -Symmetriebrechung in Form unterschiedlicher statischer elektronischer Spinsuszeptibilitäten  $\chi_{aa}$  und  $\chi_{bb}$  auf, was mittels der Messung magnetischer Drehmomente in P-dotiertem  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  nachgewiesen werden konnte [190].

Es treten also zeitgleich Symmetriebrechungen in drei unterschiedlichen Systemen auf: Im Gitter sowie im orbitalen und im Spin-System. Da vor allem die großen Anisotropien der Transporteigenschaften nicht mit der Anisotropie der Gitterparameter ( $< 1 \%$ ) erklärt werden können, muss die Ursache für die  $C_4$ -Symmetriebrechungen im elektronischen System





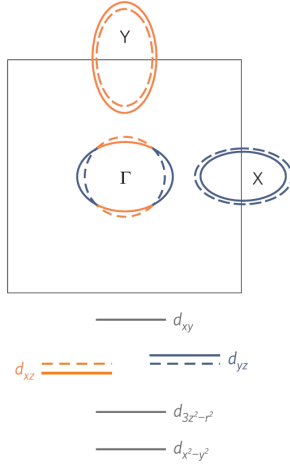
(a) In  $a$ - und  $b$ -Richtung gemessener spezifischer Widerstand für verschiedene Dotierstufen von  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  aus Ref. [184].

(b) Nernst-Koeffizient in  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  und  $\text{CaFe}_2\text{As}_2$  für Temperaturgradienten jeweils entlang der entzwilligten  $a$ - und  $b$ -Richtung aus Ref. [185].

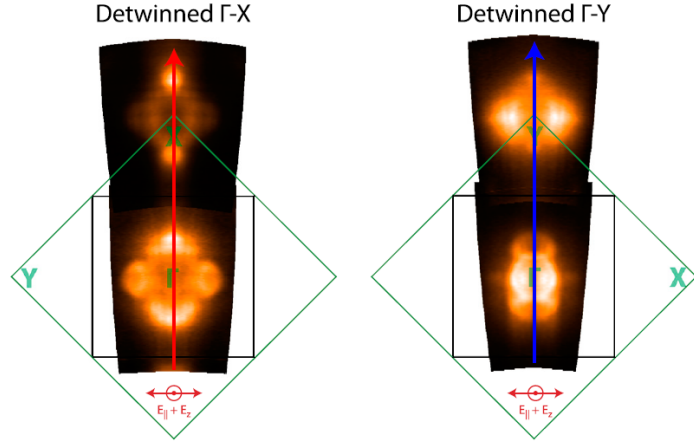
**Abbildung 5.7:** Beispiele für Anisotropien der Transportkoeffizienten in entzwilligten Vertretern der 122-Familie.

selbst liegen. Die Phase unterhalb von  $T_S$  wird deshalb als elektronisch-nematisch geordnet bzw. nematisch geordnet bezeichnet. Der Begriff „nematisch“ stammt dabei aus dem Bereich der Flüssigkristall-Physik und bezeichnet eine Ordnung, in welcher die Translationssymmetrie erhalten ist, während die Rotationssymmetrie gebrochen wird. Somit sind nicht, wie im Falle normaler struktureller Phasenübergänge, Gitterinstabilitäten in Form von Phononen für die Symmetriebrechung verantwortlich. Vielmehr folgt das Gitter lediglich dem elektronischen Phasenübergang, welcher durch Instabilitäten des elektronischen Systems getrieben wird. Es ist also wahrscheinlich, dass die Instabilitäten, die zur Ausbildung der supraleitenden Phase bei endlicher Dotierung führen, ebenfalls für die Entstehung der orbitalen und magnetischen Ordnung verantwortlich sind. Somit ist die Frage nach der Ursache der nematischen Ordnung essenziell. Je nachdem, ob die Symmetriebrechung im orbitalen oder im Spin-System den ursprünglichen Antrieb darstellt, ergeben sich unterschiedliche Symmetrien des supraleitenden Ordnungsparameters auf der Fermi-Fläche [189].

Eine theoretische Beschreibung dieses Phasenübergangs kann aus der Landau-Theorie gewonnen werden. Die Freie Energie wird als Funktion des treibenden Ordnungsparameters  $\Psi_1$  dargestellt, welcher oberhalb des Phasenübergangs Null ist und bei  $T_{\text{Nem}}$  endlich wird.  $T_{\text{Nem}}$  ist



(a) Schematische Darstellung der Energieverschiebung der verschiedenen zur Fermi-Fläche beitragenden Bänder aus Ref. [189] basierend auf einem Zwei-Orbital-Modell. Es kommt zu einer Vergrößerung bzw. Verkleinerung der Elektronen-Taschen am Rand sowie zu einer Verzerrung der Loch-Tasche im Zentrum der Brillouin-Zone.



(b) Fermi-Fläche als Ergebnis der ARPES-Messungen aus [170]. Die Messungen wurden an entzwilligten Kristallen innerhalb der SDW-Phase (erkennbar an den zurückgefalteten Fermi-Taschen, vgl. Abbildung 5.5) durchgeführt.

**Abbildung 5.8:** Orbitale Symmetriebrechung unterhalb von  $T_S$  in eisenbasierten Supraleitern.

dabei die Temperatur des nematischen Phasenübergangs.  $\Psi_2$  und  $\Psi_3$  beschreiben jeweils die beiden anderen Ordnungsparameter, deren assoziierte Ordnung ebenfalls bei  $T_{\text{Nem}}$  eintritt. Da diese Ordnungsparameter ebenfalls die  $C_4$ -Symmetrie brechen und damit alle bilineren Kombinationen von  $\Psi_i$  invariant unter Symmetrietransformationen sind, treten diese auch in der freien Energie auf [189]. Damit lässt sich die freie Energie  $F$  wie folgt darstellen:

$$F(\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3) = \frac{\alpha}{2}\Psi_1^2 + \frac{\beta}{4}\Psi_1^4 + \lambda_{12}\Psi_1\Psi_2 + \frac{\gamma}{2}\Psi_2^2 + \lambda_{13}\Psi_1\Psi_3 + \frac{\delta}{2}\Psi_3^2 + \lambda_{23}\Psi_2\Psi_3. \quad (5.1)$$

Hierbei sind  $\lambda_{ij}$  die Kopplungskonstanten zwischen den Ordnungen  $\Psi_i$  und  $\Psi_j$  und  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  und  $\delta$  die Entwicklungsparameter der freien Energie nach den jeweiligen Ordnungsparametern. In Gleichung 5.1 beschreibt  $\Psi_1$  den treibenden Ordnungsparameter, weshalb dessen vorangehende Fluktuationen letztlich verantwortlich für den Phasenübergang bei  $T_{\text{Nem}}$  sind. Dies wird durch die zugehörige Suszeptibilität  $\chi_1$  beschrieben. Aus Gleichung 5.1 erhält man:

$$\chi_1^{-1} = \frac{\partial^2 F}{\partial \Psi_1^2} = \alpha. \quad (5.2)$$

Somit entspricht der Entwicklungsparameter  $\alpha$  der inversen Suszeptibilität  $\chi_1^{-1}$ .  $\alpha$  ist im Rahmen der Lösung des Landau-Potenzials positiv für  $T > T_{\text{Nem}}$ , negativ für  $T < T_{\text{Nem}}$  und bei  $T_{\text{Nem}}$  Null. Dadurch folgt für die Suszeptibilität  $\chi_1$  bei sinkender Temperatur ein Anstieg mit Divergenz am Phasenübergang  $T_{\text{Nem}}$ . Besteht eine endliche Kopplungskonstante  $\lambda_{12} \neq 0$ , so folgt (für  $\lambda_{23} = 0$ ) aus  $dF/d\Psi_2 \stackrel{!}{=} 0$ :

$$\Psi_2 = -\gamma^{-1} \lambda_{12} \Psi_1 . \quad (5.3)$$

Demnach wird  $\Psi_2$  sofort endlich werden, sobald die Ordnung von  $\Psi_1$  am Phasenübergang eintritt. Das gleiche gilt für die Kopplung mit  $\Psi_3$ . Somit setzen am Phasenübergang alle drei Ordnungen zugleich ein, wodurch der treibende Ordnungsparameter nicht bestimmt werden kann.

Aussagekräftiger sind hierbei jedoch die entsprechenden Suszeptibilitäten der Ordnungsparameter. Da  $\Psi_1$  auf  $\Psi_2$  und  $\Psi_3$  wie ein externes Feld wirkt, beeinflussen dessen Fluktuationen auch  $\chi_2$  und  $\chi_3$ , welche dadurch renormalisiert werden [189]. Für geringe Kopplungen folgt:

$$\tilde{\chi}_2 \approx \chi_2(1 + \lambda_{12}^2 \chi_2 \chi_1) , \quad (5.4)$$

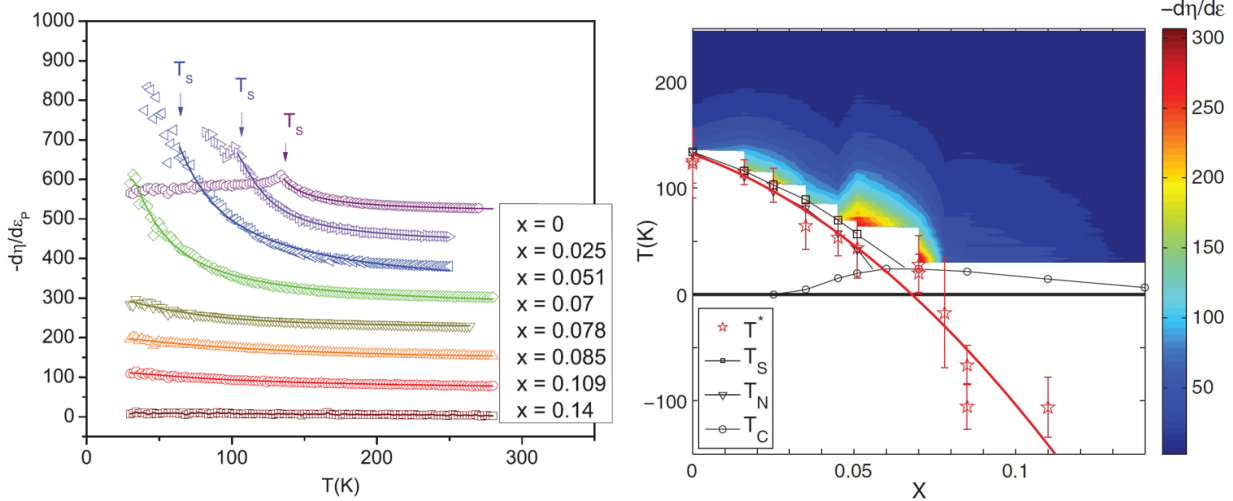
$$\tilde{\chi}_3 \approx \chi_3(1 + \lambda_{13}^2 \chi_3 \chi_1) . \quad (5.5)$$

$\chi_2$  und  $\chi_3$  divergieren somit ebenfalls bei  $T_{\text{Nem}}$ , jedoch erfolgt der Anstieg (für kleine Kopplungen) erst in der Nähe des Phasenübergangs, während  $\chi_1$  bereits groß ist. Somit würde sich durch Kenntnis der Temperaturabhängigkeit der drei Suszeptibilitäten eine Aussage über den Ursprung der nematischen Ordnung treffen lassen. Dies gilt jedoch nur für den Fall kleiner Kopplungen und falls der nematische Phasenübergang nicht erster Ordnung ist. Ist letzteres der Fall, steigen  $\chi_1$ , und somit  $\chi_2$  und  $\chi_3$ , erst bei  $T_{\text{Nem}}$  sprunghaft an und zeigen für höhere Temperaturen keine Divergenz [189].

### 5.2.1 Elasto-Widerstand

Nachdem die Anisotropie des Widerstands einen entscheidenden Hinweis auf die elektronische Natur der nematischen Ordnung gegeben hatte [184], folgte deren definitiver Nachweis sowie eine quantitative Bestimmung der elektronisch-nematischen Suszeptibilität durch Chu *et al.* in Form von Elasto-Widerstandsmessungen [191]. In Anwesenheit einer externen Dehnung  $\epsilon$  bezeichnet man den Widerstand entlang der Dehnrichtung als  $\rho_b$  und senkrecht dazu als  $\rho_a$ . Es kann argumentiert werden, dass die Widerstandsanisotropie  $\psi = (\rho_b - \rho_a)/(\rho_b + \rho_a)$  dem nematischen Ordnungsparameter  $\eta$  entspricht, falls der Anstieg von  $\rho_b$  gleich dem Abfall von  $\rho_a$  ist [191]. Somit gilt  $\psi = \eta$ , woraus für deren Ableitungen nach der Dehnung folgt [190]:

$$\frac{d\eta}{d\epsilon} \propto \frac{d\psi}{d\epsilon} . \quad (5.6)$$



(a) Nematische Suszeptibilität (entspricht der Ableitung der Widerstandsanisotropie  $\psi$  nach der Dehnung  $\epsilon$  im Limit  $\epsilon \rightarrow 0$ ) in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  für verschiedene Co-Konzentrationen  $x$  in Abhängigkeit der Temperatur aus Ref. [191].

(b) Phasendiagramm der nematischen Suszeptibilität in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  in Abhängigkeit von  $T$  und  $x$  aus Ref. [191]. Die aus Curie-Weiss-Anpassungen erhaltenen Temperaturen  $T^*$  sind als rote Sterne dargestellt.

**Abbildung 5.9:** Messungen der elektronisch-nematischen Suszeptibilität via dehnungsabhängiger Messungen der Widerstandsanisotropie.

Ausgehend von der freien Energie

$$F = \frac{a}{2}\psi^2 + \frac{b}{4}\psi^4 + \frac{c}{2}\epsilon^2 + \frac{d}{4}\epsilon^4 - \lambda\psi\epsilon - h\epsilon, \quad (5.7)$$

welche die externen Parameter Dehnung  $\epsilon$  und (mechanische) Spannung  $h$ , die Entwicklungsparameter  $a$ ,  $b$ ,  $c$  und  $d$  sowie die Kopplungskonstante  $\lambda$  enthält, können die Ableitungen des Ordnungsparameters  $\psi$  nach  $h$  und  $\epsilon$  gebildet werden [191]:

$$\frac{d\psi}{dh} = \frac{\lambda}{ac - \lambda^2}, \quad (5.8)$$

$$\frac{d\psi}{d\epsilon} = \frac{\lambda}{a}. \quad (5.9)$$

Falls der Ursprung des nematischen Phasenübergangs elektronischer Natur ist, folgt aus Gleichung 5.7, dass der Koeffizient  $a$  bei einer kritischen Temperatur  $T^*$  (entspricht  $T_{\text{Nem}}$ ) Null wird, also gilt  $a = a_0(T - T^*)$ . Falls der Übergang jedoch durch eine strukturelle Instabilität des Gitters hervorgerufen wird, so gilt  $c = c_0(T - T^*)$  [191, 192]. Während somit die Abhängigkeit der Widerstandsanisotropie  $\psi$  von einer externen Spannung  $h$  (Gleichung 5.8) sowohl für den Fall einer elektronischen als auch einer strukturellen Instabilität bei  $T^*$  divergiert, gilt dies für die Abhängigkeit der Widerstandsanisotropie von einer Dehnung (Gleichung 5.9) nur,

wenn die nematische Ordnung elektronischer Natur ist. Ein Nachweis einer in Abhängigkeit der Dehnung divergierenden Widerstandsanisotropie ist also ein direkter Nachweis für den elektronischen Ursprung der Symmetriebrechung in der nematischen Phase. Abbildung 5.9a zeigt die aus solchen Messungen erhaltene nematische Suszeptibilität  $d\eta/d\epsilon$  in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  für verschiedene Co-Dotierungen. Deutlich ist der Anstieg der Suszeptibilität mit sinkender Temperatur bis hin zu  $T_S$  zu erkennen, jedoch tritt die Divergenz nicht genau am Phasenübergang auf. Dies kann mithilfe der bilinearen Kopplung zwischen dem elektronischen System und dem Gitter erklärt werden (vgl. Gleichung 5.7), wodurch die kritische Temperatur angehoben wird [190, 191]:

$$T_S = T^* + \frac{\lambda^2}{a_0 c} . \quad (5.10)$$

Auffällig ist, dass der divergente Anstieg selbst für Dotierstufen bestehen bleibt, in welchen kein struktureller bzw. nematischer Phasenübergang auftritt. Vielmehr sind die nematischen Fluktuationen, welche zum Anstieg der Suszeptibilität führen, im gesamten untersuchten Dotierbereich nachweisbar. In Abbildung 5.9b sind die Daten in Form eines Phasendiagramms in Abhängigkeit von  $T$  und  $x$  dargestellt. Hier wird deutlich ein nicht-monotones Verhalten der Suszeptibilität sichtbar, mit einem Maximum knapp unterhalb der optimalen Dotierung im Bereich, in dem der magnetische und der strukturelle Phasenübergang verschwinden. Aus einer Curie-Weiss-Anpassung der temperaturabhängigen Suszeptibilität erhält man die kritische Temperatur  $T^*$  (rote Sterne in Abbildung 5.9b), welche monoton mit steigender Dotierung abfällt, den Wert Null im Bereich der optimalen Dotierung erreicht und anschließend negativ wird. In der Tat wurde dieses Verhalten in vielen optimal dotierten Vertretern der eisenbasierten Supraleiter gefunden, welche eine Divergenz des Elasto-Widerstands mit  $T_{\text{Nem}}$  bzw.  $T^* \approx 0$  zeigen [193]. Die Supraleitung scheint also genau bei solchen Dotierungen am stärksten zu sein (also die höchste Sprungtemperatur  $T_c$  aufzuweisen), bei denen die nematische Ordnung verschwinden würde ( $T_{\text{Nem}}$  bzw.  $T^* \approx 0$ ). Dies deutet auf die Existenz eines nematischen quantenkritischen Punkts hin, welche mit dem Vorhandensein nematischer quantenkritischer Fluktuationen in diesem Bereich des Phasendiagramms einhergeht. In der Tat zeigen theoretische Betrachtungen, dass es durch diese Fluktuationen zu einer starken Erhöhung von  $T_c$  kommen kann [194–196].

All diese Eigenschaften weisen darauf hin, dass ein tieferes Verständnis der nematischen Phase und insbesondere ihres Fluktuationsregimes, welches sich über den gesamten relevanten Bereich der Phasendiagramme eisenbasierter Supraleiter erstreckt, essentiell für das Entschlüsseln der Hochtemperatursupraleitung in diesen Materialien ist. Deshalb sollen sich die Analysen in dieser Arbeit im Folgenden auf eben jene nematische Fluktuationen konzentrieren und mithilfe thermoelektrischer Transportmessungen Co-dotiertem  $\text{LaFeAsO}$ , auch im Vergleich mit Rh-dotiertem  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ , einen Beitrag zum Verständnis von eisenbasierten Supraleitern liefern.

## 5.3 Co-dotiertes LaFeAsO

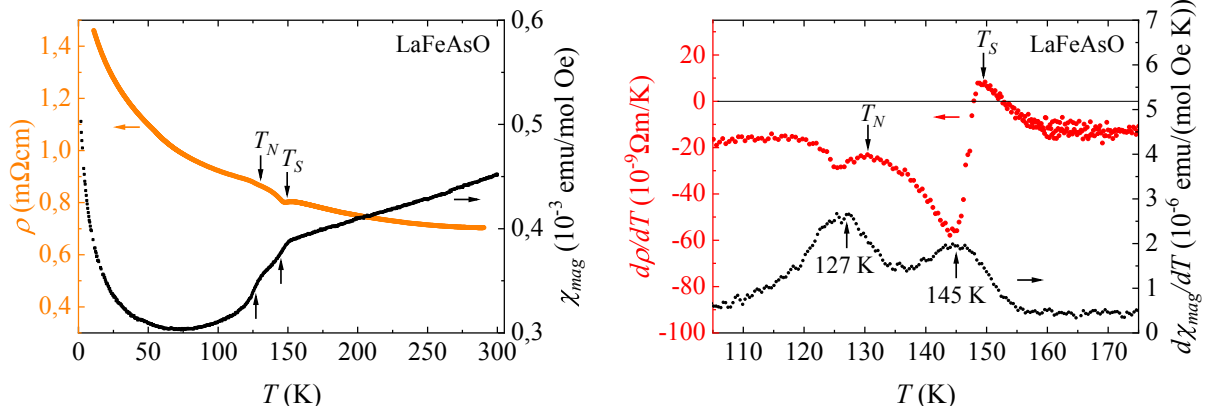
Einer der Hauptvertreter der 1111-Familie der eisenbasierten Supraleiter ist LaFeAsO. Nach der Entdeckung der Supraleitung in LaFeAsO<sub>1-x</sub>F<sub>x</sub> [143] (vgl. Abschnitt 5.1) wurde später erkannt, dass die Supraleitung in LaFeAsO<sub>1- $\delta$</sub>  ebenfalls mit einem O-Mangel anstelle einer F-Dotierung erreicht werden kann, wobei maximale Sprungtemperaturen von bis zu  $T_c = 21$  K für  $\delta = 0,15$  auftreten [197]. Auch die Substitution von Fe mit Co erzeugt einen supraleitenden Grundzustand im optimal dotierten Bereich mit ersten Anzeichen eines supraleitenden Übergangs bei  $T \approx 14$  K [198].

In dieser Arbeit werden Transportmessungen an LaFe<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>AsO mit nominellen Co-Konzentrationen  $x$  von  $x = 0$  %, 2,5 %, 3,5 %, 4,7 %, 5,6 %, 6 % und 7,5 % vorgestellt. Die Kristalle wurden von Rhea Kappenberger, Saicharan Aswartham und Sabine Wurmehl am IFW Dresden mittels des Festkörper-Einkristallwachstums gezüchtet und mithilfe von energiedispersiver Röntgenspektroskopie charakterisiert [199].

### 5.3.1 Spezifischer Widerstand und Hall-Effekt in LaFe<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>AsO

Elektrische Transportmessungen an LaFe<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>AsO wurden innerhalb der *ab*-Ebene (FeAs-Ebene, vgl. Abbildung 5.1) durchgeführt, sowohl der Strom als auch die gemessene Spannung befinden sich also innerhalb dieser Ebene. Für Hall-Effekt-Messungen wurde ein Magnetfeld senkrecht zur *ab*-Ebene angelegt. Da die Richtung innerhalb der Ebene willkürlich gewählt wurde, wird im Folgenden  $\rho$  anstelle von  $\rho_{ii}$  als Formelzeichen für den spezifischen Widerstand verwendet. Der Hall-Widerstand wird hingegen zur Unterscheidung als  $\rho_{xy}$  bezeichnet. Die Messungen des spezifischen Widerstands und des Hall-Effekts der Proben mit Co-Konzentration von  $x = 0$  und  $x = 3,5$  % wurden von Federico Caglieris durchgeführt.

Abbildung 5.10a zeigt den spezifischen Widerstand des undotierten LaFeAsO-Kristalls in Abhängigkeit der Temperatur (orangene Punkte, linke Achse). Auffallend ist, dass sich, von Raumtemperatur abkühlend, ein monoton steigendes  $\rho$  zeigt. Nur im Bereich der Phasenübergänge zeigt sich ein lokales Maximum des Widerstands bei  $T \approx 152$  K bevor es zu einem Knick kommt. Mithilfe der Ableitung des spezifischen Widerstandes nach der Temperatur, dargestellt in Abbildung 5.10b (rote Punkte, linke Achse), lassen sich die Temperaturen der Phasenübergänge bestimmen. Dabei wird die Position der Phasenübergänge mit den Maxima der Temperaturableitung des spezifischen Widerstands identifiziert, welche einem Wendepunkt von  $\rho$  darstellen. Dieser wird durch die konkurrierenden Prozesse, die zum elektrischen Widerstand beitragen, verursacht. Wird der strukturelle Phasenübergang erreicht, so wird mit Einsetzen der langreichweitigen Ordnung die Streuung der Elektronen an Gitterfluktuationen verringert, wodurch der Widerstand abfällt. In der Nähe des magnetischen Phasenübergangs kann ähnlich argumentiert werden. Zusätzlich verringert sich hier die Ladungsträgerdichte aufgrund der Öffnung einer Energielücke, wodurch auch die Elektron-Elektron-Streuung abnimmt. Außerdem



(a) Spezifischer Widerstand (orangene Punkte, linke Achse) und magnetische Suszeptibilität aus Ref. [199] (schwarze Punkte, rechte Achse) von  $\text{LaFeAsO}$  in Abhängigkeit der Temperatur. Markiert sind die Temperaturen der durch die jeweiligen Messsonden detektierten Phasenübergänge  $T_S$  und  $T_N$ .

(b) Ableitung des spezifischen Widerstands  $d\rho/dT$  (rote Punkte, linke Achse) und Ableitung der magnetischen Suszeptibilität  $d\chi_{\text{mag}}/dT$  aus Ref. [199] (schwarze Punkte, rechte Achse) von  $\text{LaFeAsO}$  in Abhängigkeit der Temperatur. Anhand der Extrema lassen sich  $T_S$  und  $T_N$  bestimmen. Für den spezifischen Widerstand ergeben sich  $T_S \approx 149,5 \text{ K}$  und  $T_N \approx 130,5 \text{ K}$ .

**Abbildung 5.10:** Spezifischer Widerstand und magnetische Suszeptibilität (aus Ref. [199]) von  $\text{LaFeAsO}$ .

können all diese Effekte aufgrund einer hohen Anzahl von Gitterdefekten beeinflusst werden. Eine genaue Vorhersage darüber, ob der Widerstand im Bereich eines Phasenübergangs zu- oder abnimmt, hängt also von den mikroskopischen Eigenschaften des Systems ab. Trotz allem zeigt ein Wendepunkt von  $\rho(T)$  eine Änderung dieser Einflüsse an und soll hier als Indikator der Phasenübergänge genutzt werden. Für den strukturellen Phasenübergang ergibt sich somit  $T_S \approx 149,5 \text{ K}$  und für den magnetischen Phasenübergang  $T_N \approx 130,5 \text{ K}$ .

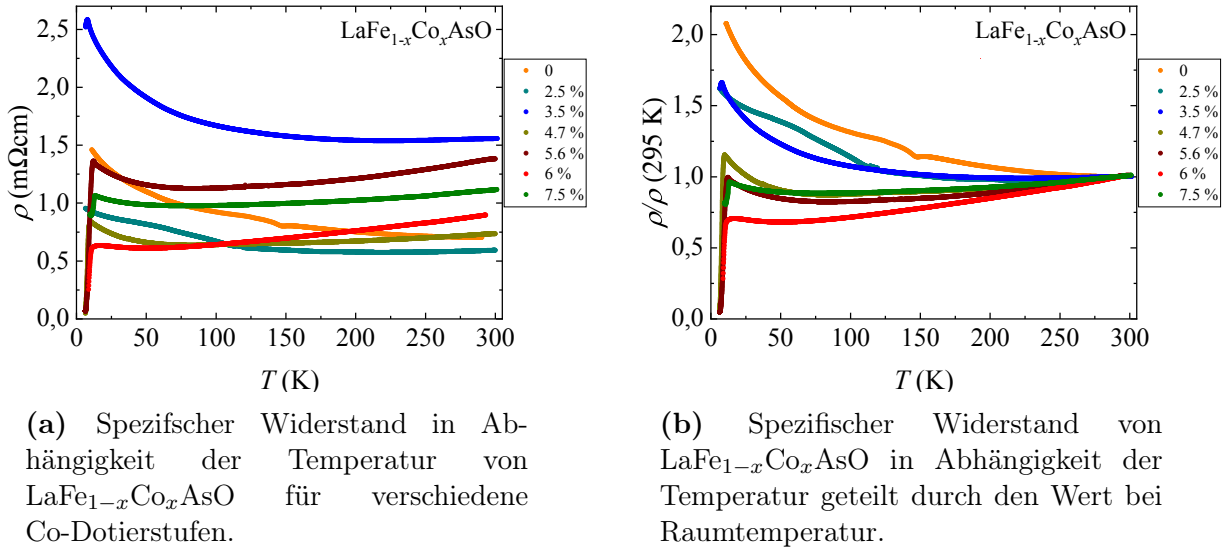
Diese Temperaturen stimmen jedoch nicht mit den Ergebnissen von Messungen der magnetischen Suszeptibilität aus Ref. [199] überein, welche an den gleichen  $\text{LaFeAsO}$ -Einkristallen durchgeführt wurden. Zum Vergleich sind die magnetische Suszeptibilität  $\chi_{\text{mag}}$  sowie die Ableitung der magnetischen Suszeptibilität nach der Temperatur aus Ref. [199] jeweils in Abbildung 5.10a und in Abbildung 5.10b (jeweils schwarze Punkte, rechte Achse) dargestellt. Die Phasenübergänge werden mit dieser magnetischen Sonde als Positionen der Maxima der Ableitung in Abbildung 5.10b auf  $T_S = 145 \text{ K}$  und  $T_N = 127 \text{ K}$  festgelegt. Auch mittels Messungen der spezifischen Wärmekapazität erhält man leicht verschiedene Werte von  $T_S = 147 \text{ K}$  und  $T_N = 124 \text{ K}$  [199].

Eine solche Diskrepanz zwischen Transport- und magnetischen Sonden wurde bereits in frühen Messungen an polykristallinem  $\text{LaFeAsO}$  beobachtet [200]. Dabei lagen die von der spezifischen Wärmekapazität und von der magnetischen Suszeptibilität festgestellten Phasen-

übergangstemperaturen systematisch niedriger als die des spezifischen Widerstands. Diese unterschiedlichen Ergebnisse sind auf die komplexen Zusammenspiele verschiedener Eigenschaften des Gitters und der Elektronen im Bereich von  $T_S$  und  $T_N$  zurückzuführen. Wie bereits in Abschnitt 5.2 beschrieben, sind die Ordnungsparameter in eisenbasierte Supraleitern eng miteinander verknüpft und es existiert ein starker und ausgedehnter Fluktuationsbereich. Die verschiedenen Messsonden sind dabei auf unterschiedliche Eigenschaften des Systems sensitiv. Für die exakte Bestimmung der Übergänge müssten demnach die Ordnungsparameter direkt gemessen werden. Für den strukturellen Phasenübergang gestaltet sich dies jedoch schwierig, da, im Gegensatz zu  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ , in  $\text{LaFeAsO}$  bei Messungen der Gitterparameter aufgrund des Übergangs 2. Ordnung nicht eindeutig zwischen Fluktuationsbereich und dem eigentlichen Übergang unterschieden werden kann [163, 201]. In polykristallinem  $\text{LaFeAsO}$  ist der strukturelle Phasenübergang hingegen als plötzliche Änderung der Gitterparameter erkennbar [200], jedoch zeigt sich auch ein anderer Verlauf des spezifischen Widerstands. Dieser fällt für hohe Temperaturen zunächst bis zu einem Minimum bei  $T \approx 220$  K leicht ab und steigt anschließend mit fallender Temperatur leicht an. Beim strukturellen Phasenübergang zeigt sich ein lokales Maximum und  $\rho$  fällt unterhalb von  $T_S$  stark ab und durchläuft einen Wendepunkt bei  $T_N$ , worauf der negative Anstieg wieder abnimmt. Bei  $T \approx 90$  K tritt ein Minimum auf und anschließend steigt  $\rho$  zu tiefen Temperaturen hin an [143, 200, 202–204].

Dies steht im Gegensatz zu dem hier gemessenen, nahezu im gesamten untersuchten Temperaturbereich monoton ansteigenden spezifischen Widerstand (siehe Abbildung 5.10a). Dieses Verhalten deutet auf eine, trotz der Einkristallinität der Probe, vorhandene stark erhöhte Defektdichte hin, welche die mittlere freie Weglänge so weit reduziert, dass Einflüsse der Phasenübergänge auf den Widerstand nur schwach zu erkennen sind. Ein ähnlicher Verlauf des Widerstands wurde in Ref. [205] in  $\text{LaFeAsO}$ -Einkristallen festgestellt, jedoch wurden mit 132 K und 114 K wesentlich geringere Temperaturen der Phasenübergänge beobachtet. Dieser Unterschied lässt eventuell auf eine Form ungewollter Dotierung in Ref. [205] schließen. Zudem führten die Autoren eine Arrhenius-Analyse des Widerstands oberhalb von  $T_S$  durch, wobei sich im Falle eines Halbleiters mit der Energielücke  $\Delta$  der lineare Zusammenhang zwischen  $\ln \rho$  und  $1/T$  als  $\ln \rho = \Delta/(2k_B T)$  ergibt. Somit konnte eine Energielücke  $\Delta \approx 9,5$  meV bestimmt werden [205]. Führt man eine identische Analyse für die hier gemessenen Daten (oberhalb von  $T_S$ ) durch, ergibt sich eine Energielücke von  $\Delta \approx 8,8$  meV. Jedoch sollte dies nicht als Beweis eines halbleitenden Zustands in  $\text{LaFeAsO}$  gelten, da ein solcher Anstieg des Widerstands, wie oben beschrieben, durch zahlreiche Prozesse hervorgerufen werden kann. Die Erhöhung des Widerstandes hin zu tiefen Temperaturen in der SDW-Phase, welche auch in Polykristallen auftritt, lässt sich eher als Lokalisierung von Ladungsträgern interpretieren [203]. Ferner sagen Bandstrukturechnungen voraus, dass  $\text{LaFeAsO}$  bei tiefen Temperaturen einen halbmetallischen Charakter aufweist [206], was zur zusätzlichen Reduktion der Ladungsträgerdichte führt.

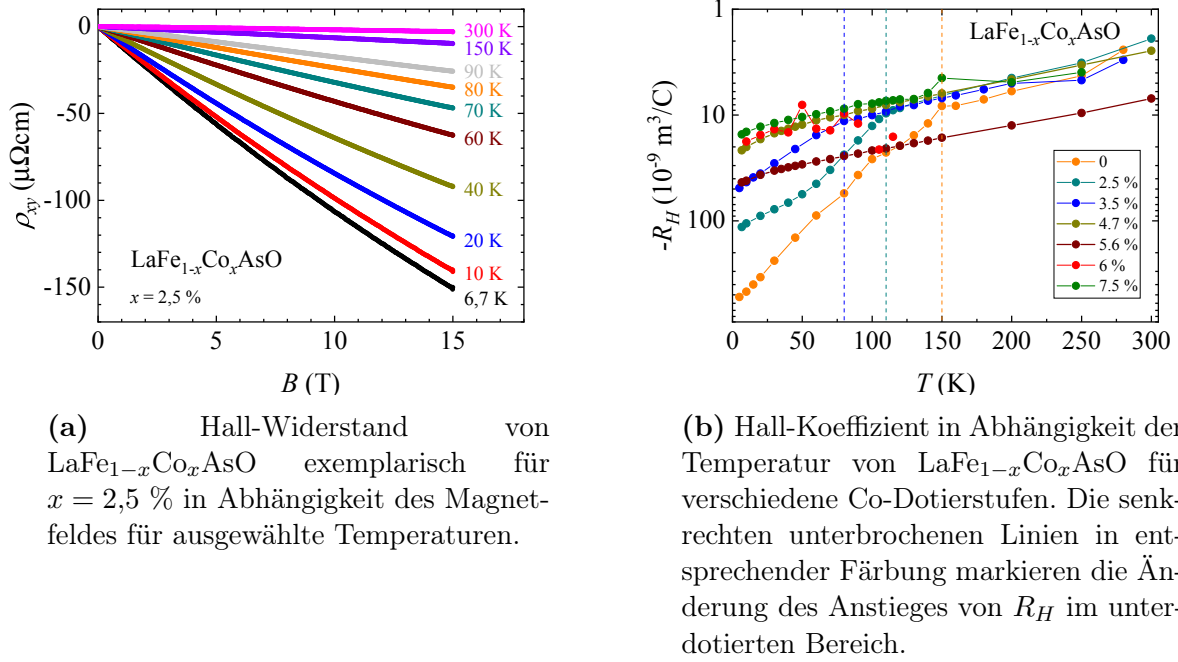




**Abbildung 5.11:** Messungen des spezifischen elektrischen Widerstands an  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ .

Die spezifischen Widerstände aller Co-Konzentrationen von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  werden in Abbildung 5.11a gezeigt. Aus diesen Absolutwerten ist zunächst kein systematisches Verhalten in Abhängigkeit der Dotierung zu erkennen. Aufgrund der endlichen Ausdehnung der Klebeflächen der elektrischen Kontakte können geometrische Fehler im Bereich 50 – 100 % auftreten (vgl. Kapitel 3), welche jedoch nur den Absolutwert und nicht die Temperaturabhängigkeit des spezifischen Widerstands beeinflussen. Um die Temperaturabhängigkeiten der einzelnen Proben besser miteinander vergleichen zu können, sind die Widerstände in Abbildung 5.11b normiert auf ihren Wert bei Raumtemperatur (295 K) dargestellt. Hierbei ist, mit Ausnahme von  $x = 7,5$  %, eine systematische Abnahme des Widerstands mit steigender Dotierung erkennbar. Der stetige monotone Anstieg von  $\rho$  in Abhängigkeit der Temperatur beim Abkühlen von  $\text{LaFeAsO}$  wird mit endlicher Co-Dotierung leicht unterdrückt. So zeigt sich für  $x = 2,5$  % zunächst ein Abfall des Widerstandes hin zu einem lokalen Minimum bei  $T \approx 220$  K, wonach  $\rho$  jedoch für weiteres Abkühlen stetig ansteigt und dabei zwei Wendepunkte bei  $T \approx 108$  K und  $T \approx 68$  K aufweist. Messungen der magnetischen Suszeptibilität, welche an den gleichen Dotierungsserien von Francesco Scaravaggi am IFW Dresden durchgeführt wurden, detektieren für  $x = 2,5$  % einen strukturellen Übergang bei  $T_S = 105$  K und einen magnetischen Übergang bei  $T_N = 65$  K [201]. Ähnliche Übergangstemperaturen wurden mit  $T_S \approx 110$  K und  $T_N \approx 70$  K auch durch Messungen der thermischen Ausdehnung festgestellt [163]. Somit können die Wendepunkte des elektrischen Widerstands als Signaturen der Phasenübergänge interpretiert werden (siehe oben). Deshalb werden für weitere Analysen der Transportkoeffizienten für  $x = 2,5$  % die Temperaturen  $T_S \approx 108$  K und  $T_N \approx 68$  K verwendet.

Für alle weiteren Co-Dotierungen konnte der strukturelle und der magnetische Phasenübergang im spezifischen Widerstand nicht zweifelsfrei nachgewiesen werden. Für  $x = 3,5$  % zeigt



**Abbildung 5.12:** Messungen des Hall-Effekts an  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ .

sich ebenfalls ein lokales Minimum von  $\rho$  bei  $T \approx 220$  K und anschließend ein Anstieg ohne jegliche Merkmale hin zu tiefen Temperaturen. Messungen der magnetischen Suszeptibilität konnten für die Co-Konzentration ebenfalls keinen strukturellen Phasenübergang nachweisen, jedoch ergibt sich  $T_N = 31$  K [201]. Dahingegen erhält man aus NMR-Messungen, die an der gleichen  $\text{LaFeAsO}$ -Dotierungsserie von Piotr Lepucki am IFW Dresden durchgeführt wurden,  $T_S \approx 80$  K und  $T_N \approx 30$  K [207], welche ebenfalls von Messungen der thermischen Ausdehnung bestätigt wurden [163] und deshalb im Folgenden zur weiteren Analyse herangezogen werden sollen.

Mit steigender Dotierung wandert das Minimum sehr schnell zu tieferen Temperaturen und es entsteht ein großer Temperaturbereich mit einem abfallenden Widerstand. Bei  $x = 4,7 \%$  befindet sich das Minimum bei  $T \approx 90$  K, darunter steigt der Widerstand wieder an bevor es zu einem supraleitenden Phasenübergang mit einem beginnenden Abfall des Widerstands bei  $T_c = 9,8$  K kommt. Der strukturelle Phasenübergang liegt bei  $T_S \approx 60$  K und der magnetische bei  $T_N \approx 20$  K [208]. Für  $x = 5,6 \%$  befindet sich das Minimum bei  $T \approx 85$  K, während  $T_c = 10$  K ist. Die optimal dotierte Probe mit  $x = 6 \%$  zeigt ein Minimum bei  $T \approx 50$  K, worauf mit weiter abfallender Temperatur nur ein kleiner Anstieg folgt, bevor die Supraleitung bei  $T_c = 10,5$  K eintritt. Im überdotierten Bereich ( $x = 7,5 \%$ ) steigt das Minimum wieder auf  $T \approx 75$  K an. Für diese Probe setzt der supraleitende Übergang zwar bereits bei 13 K ein, jedoch fällt der Widerstand im gemessenen Temperaturbereich nur auf ein Plateau ab.

Über die gesamte Dotierreihe ändert sich das Verhalten des spezifischen Widerstandes von halbleiterartig mit lokalisierendem Verhalten der Ladungsträger hin zu metallisch, wobei sich

selbst in den großen Temperaturbereichen, in denen  $\rho$  mit sinkender Temperatur abfällt, der Absolutwert des Widerstandes kaum verringert.

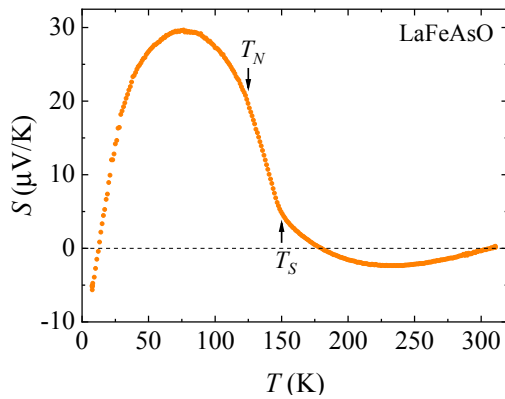
Der Hall-Effekt wurde für alle Dotierstufen von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  mithilfe eines externen Magnetfeldes von bis zu 15 T gemessen. Abbildung 5.12a zeigt am Beispiel des  $\text{LaFeAsO}$ -Kristalls mit einer Co-Konzentration von  $x = 2,5\%$  den Hall-Widerstand  $\rho_{xy}$  in Abhängigkeit des Magnetfeldes. Mithilfe einer linearen Anpassung der feldabhängigen Daten lässt sich der Hall-Koeffizient  $R_H$  als Anstieg des Hall-Widerstandes für jede Temperatur bestimmen (vgl. Kapitel 2.1.2). Oberhalb der supraleitenden Phase wurde für alle Proben eine lineare Abhängigkeit gemessen, welche lediglich bei niedrigen Temperaturen in der nematischen Phase und hohen Magnetfeldern kleine Abweichungen vom linearen Verlauf zeigt. In einem solchen Fall wurde nur der Anstieg bei niedrigen Feldern berücksichtigt. Abbildung 5.12b zeigt den Hall-Koeffizienten für alle untersuchten Co-Konzentrationen in Abhängigkeit der Temperatur in einer semi-logarithmischen Darstellung.  $R_H$  ist für alle Co-Konzentrationen und alle gemessenen Temperaturen negativ, woraus sich schließen lässt, dass Elektronen in diesem System die Majoritätsladungsträger darstellen.

Mit sinkender Temperatur steigt für alle Co-Konzentrationen der Absolutwert  $|R_H|$  an. In den unterdotierten Proben zeigt sich der Phasenübergang zur orthorhombischen Phase als Knick im Verlauf des Hall-Koeffizienten, wobei  $|R_H|$  anschließend einen noch stärkeren Anstieg um ungefähr eine Größenordnung ausbildet. Diese Änderungen des Anstiegs befinden sich für  $x = 0$  bei  $T \approx 150$  K, für  $x = 2,5\%$  bei  $T \approx 110$  K und für  $x = 3,5\%$  bei  $T \approx 80$  K und sind in Abbildung 5.12b durch senkrechte unterbrochene Linien dargestellt. Für alle anderen Proben, die keinen nematischen Phasenübergang durchlaufen, existiert kein solcher Knick, jedoch wird der Anstieg bei tiefen Temperaturen steiler. Der Verlauf von  $R_H$  in  $\text{LaFeAsO}$  stimmt dabei gut mit der Literatur überein [209, 210]. Zum Vergleich von  $R_H$  in den supraleitenden Proben kann lediglich Literatur zu  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  herangezogen werden, wobei ebenfalls absolut monoton steigende, negative  $R_H$  gemessen wurden [210, 211].

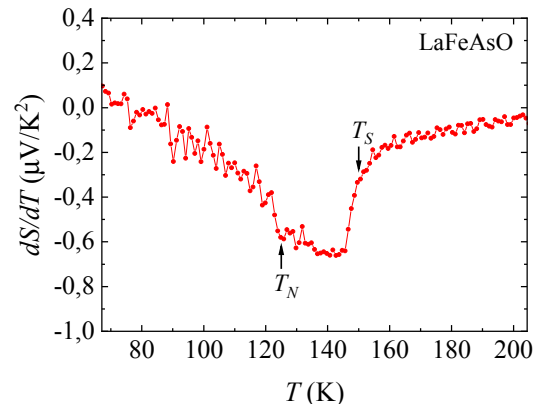
### 5.3.2 Seebeck-Effekt in $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$

Zur Messung des Seebeck-Effekts in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  wurde der Temperaturgradient in der  $ab$ -Ebene der Kristalle angelegt und parallel dazu die thermoelektrische Spannung erfasst. Da die Richtung innerhalb der Ebene willkürlich gewählt wurde, wird im Folgenden  $S$  anstelle von  $S_{ii}$  als Formelzeichen für den Seebeck-Koeffizienten verwendet.

Abbildung 5.13a zeigt  $S$  in Abhängigkeit der Temperatur für undotiertes  $\text{LaFeAsO}$ . Bei Raumtemperatur ist  $S$  fast Null und positiv. Mit sinkender Temperatur wird  $S$  negativ und entwickelt ein Minimum (bzw. ein Maximum des Absolutwertes  $|S|$ ) bei rund  $-2,5 \mu\text{V/K}$  und 235 K. Anschließend steigt der Seebeck-Koeffizient monoton an, wechselt bei  $T \approx 180$  K erneut das Vorzeichen und wird positiv. Am strukturellen Phasenübergang bei  $T_S$  ist ein Knick erkennbar, wonach  $S$  mit weiter fallender Temperatur noch stärker ansteigt. Ein weiterer



(a) Seebeck-Koeffizient von LaFeAsO in Abhängigkeit der Temperatur.

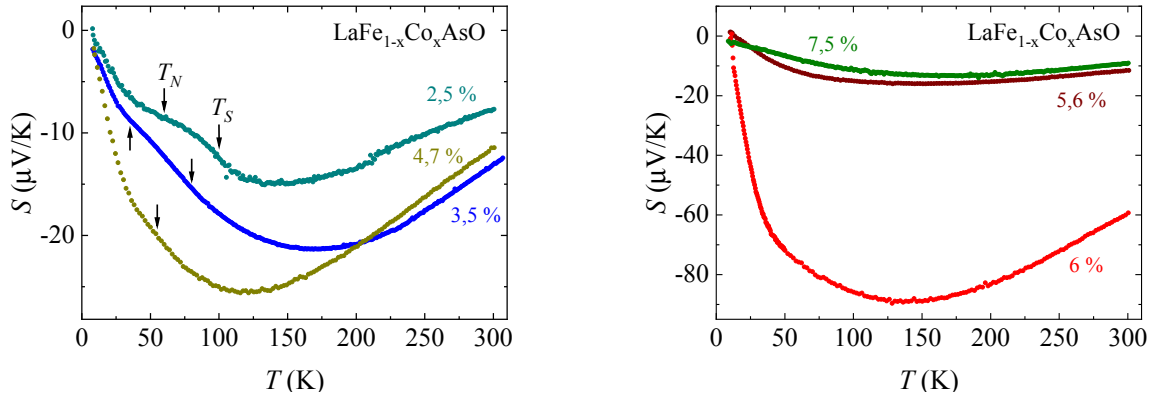


(b) Ableitung  $dS/dT$  in Abhängigkeit der Temperatur. Die Änderungen des Anstiegs an den Phasenübergängen sind deutlich sichtbar. Man erhält Werte für  $T_S \approx 150$  K und  $T_N \approx 125$  K.

**Abbildung 5.13:** Messungen des Seebeck-Effekts an LaFeAsO.

schwacher Knick befindet sich am magnetischen Übergang bei  $T_N$ . Nach dem Durchlaufen dieses Phasenübergangs bildet sich ein Maximum bei  $S \approx 30 \mu\text{V/K}$  und  $T \approx 75$  K. Anschließend fällt  $S$  zu tiefen Temperaturen hin stark ab und durchläuft erneut einen Vorzeichenwechsel bei  $T \approx 13$  K. Die genaue Position der Phasenübergänge lässt sich aus der Ableitung des Seebeck-Koeffizienten nach der Temperatur bestimmen, welche in Abbildung 5.13b dargestellt ist. Aus den starken Änderungen des Anstiegs  $dS/dT$  ergibt sich für den strukturellen Phasenübergang  $T_S \approx 150$  K und für den magnetischen Phasenübergang  $T_N \approx 125$  K. Dabei weicht der magnetische Phasenübergang von dem in Abschnitt 5.3.1 mithilfe des spezifischen elektrischen Widerstands bestimmten Wertes von  $T_N \approx 130,5$  K ab. Dies wirft die Frage auf, ob anstelle des lokalen Maximums von  $d\rho/dT$  bei  $T \approx 130,5$  K eher das benachbarte Minimum bei  $T \approx 125,5$  K (vgl. Abbildung 5.10b) als magnetischer Übergang identifiziert werden sollte, nicht zuletzt, da die Übergangstemperaturen für  $x = 2,5$  % ebenfalls in den Minima von  $d\rho/dT$  platziert wurden (scharfe Maxima waren nicht vorhanden). Dies würde mit dem Ergebnis der Seebeck-Messung übereinstimmen. In beiden Fällen verbleibt jedoch die ungeklärte Ursache der verbleibenden Wendepunkte (Minima bzw. Maxima in  $d\rho/dT$ ), welche über bzw. unterhalb der Phasenübergänge auftreten und in der Temperaturabhängigkeit des Seebeck-Koeffizienten nicht sichtbar sind. Diese Diskrepanzen entstehen durch die unterschiedlichen Abhängigkeiten der Transportgrößen von den elektronischen Eigenschaften (vgl. Kapitel 2) und sind ein weiterer Hinweis auf die Wechselwirkungen verschiedener Effekte im Temperaturregime zwischen den Phasenübergängen in LaFeAsO.

Ein Vergleich der temperaturabhängigen Daten des Seebeck-Koeffizienten mit der Literatur liefert ein widersprüchliches Bild. In den meisten Arbeiten wird  $S$  im gesamten Temperaturbereich als negativ bestimmt [209, 212, 213] und zeigt zwei lokale Minima und ein lokales



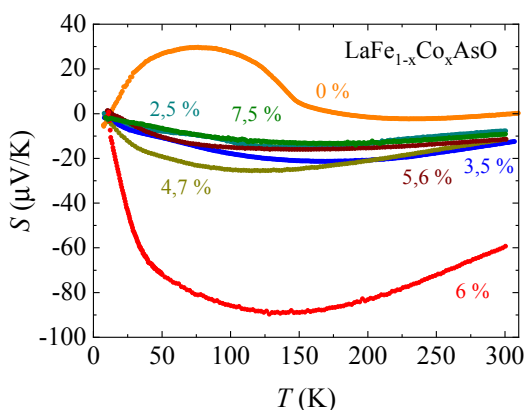
(a) Seebeck-Koeffizient von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  für ausgewählte Dotierstufen im unterdotierten Bereich in Abhängigkeit der Temperatur. Markiert sind die bestimmten Phasenübergangstemperaturen.

(b) Seebeck-Koeffizient von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  für ausgewählte Dotierstufen in der Nähe des optimal dotierten Bereichs in Abhängigkeit der Temperatur.

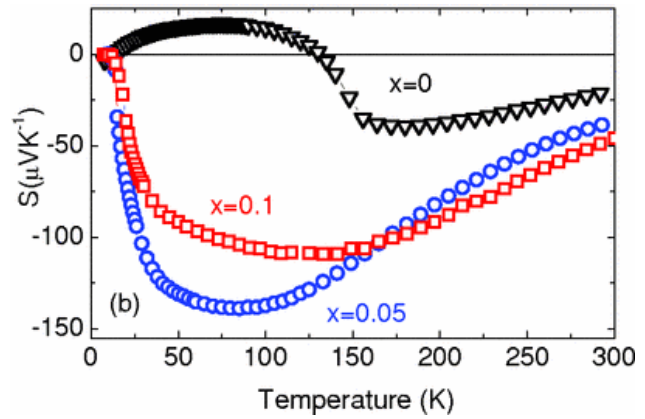
**Abbildung 5.14:** Messungen des Seebeck-Effekts an  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  für ausgewählte Co-Konzentrationen.

Maximum. Lediglich in Ref. [200] und [210] kommt es anstelle des zweiten Minimums und des Maximums zu einem Vorzeichenwechsel und einem ausgeprägten Maximum unterhalb von 100 K, ähnlich der hier gezeigten Daten (Abbildung 5.13a). Ferner erstreckt sich das Minimum bei höheren Temperaturen auf bis zu  $-40 \mu\text{V/K}$ , was im Vergleich zu den hier vorgestellten Messungen einen um mehr als eine Größenordnung höheren Wert darstellt. In keiner Veröffentlichung wurde von einem positiven Seebeck-Koeffizienten bei Raumtemperatur berichtet. Eine mögliche Erklärung dieser Unterschiede könnten die unterschiedlichen Probenqualitäten sein. Die Messungen in der Literatur wurden stets an  $\text{LaFeAsO}$ -Polykristallen durchgeführt, während in dieser Arbeit Einkristalle verwendet werden. Die unter verschiedenen Polykristallen abweichenden Verläufe von  $S$  (z.B. Vorzeichenwechsel) können aufgrund unterschiedlicher Defektdichten auftreten, welche den Phonon-Drag beeinflussen (vgl. Abschnitt 2.1.4). Ein weiterer Einflussfaktor sind mit großer Wahrscheinlichkeit die unterhalb von  $T_S$  entstehenden verzwillingten Domänen. Da der Seebeck-Effekt in der nematischen Phase ebenfalls starke Anisotropien zeigt (vgl. Abschnitt 5.2), kann die unterschiedliche Anordnung der Domänen in Poly- und Einkristallen bzw. bei verschiedenen Defektdichten einen erheblichen Einfluss auf  $S$  haben. Dies könnte auch die extremen Unterschiede im Absolutwert des Seebeck-Koeffizienten erklären.

Abbildung 5.14a zeigt die temperaturabhängigen Seebeck-Koeffizienten von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  mit  $x = 2,5\%$ ,  $3,5\%$  und  $4,7\%$ . Dotiert man  $\text{LaFeAsO}$  mit  $2,5\%$  Co, so ergibt sich ein für alle gemessene Temperaturen negatives  $S$ . Dieser Verlauf ähnelt sehr dem oben beschriebener Daten von  $\text{LaFeAsO}$  aus der Literatur [209, 212, 213]. Das Verschwinden des positiven Maximums



(a) Seebeck-Koeffizient von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  für ausgewählte Dotierstufen im unterdotierten Bereich in Abhängigkeit der Temperatur.



(b) Seebeck-Koeffizient von  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  aus Ref. [210] in Abhängigkeit der Temperatur.  $x = 0,1$  entspricht der optimalen Dotierung.

**Abbildung 5.15:** Seebeck-Effekt von LaFeAsO unter Co- und F-Substitution.

bei tiefen Temperaturen bei bereits kleinen Dotierstufen bestätigt die Annahme, dass Defekte einen starken Einfluss auf den Verlauf der Temperaturabhängigkeit des Seebeck-Effekts haben. Zusätzlich bewirkt die Elektronen-Dotierung eine Verschiebung von  $S$  hin zu negativeren Werten. Das Minimum befindet sich für  $x = 2,5 \%$  bei  $S \approx -15 \mu\text{V/K}$  und  $T \approx 145 \text{ K}$ . Der strukturelle Phasenübergang befindet sich bei  $T_S \approx 100 \text{ K}$  und der magnetische Phasenübergang bei  $T_N \approx 60 \text{ K}$ . Beide Temperaturen liegen etwas unterhalb der durch Messungen der magnetischen Suszeptibilität detektierten Werte (105 K und 65 K) [201]. Für steigende Co-Dotierung erhöhen sich die Absolutwerte  $|S|$  noch weiter. Für  $x = 3,5 \%$  befindet sich das Minimum bei  $S \approx -20 \mu\text{V/K}$  und  $T \approx 170 \text{ K}$ . Die Temperaturen der Phasenübergänge können als  $T_S \approx 80 \text{ K}$  und  $T_N \approx 35 \text{ K}$  bestimmt werden, was gut mit NMR-Messungen übereinstimmt [207]. Für  $x = 4,7 \%$  hingegen liegt das Minimum bei  $S \approx -25 \mu\text{V/K}$  und  $T \approx 115 \text{ K}$ . Der Absolutwert von  $S$  steigt also mit steigender Dotierung an, während sich die Temperatur des Minimums nicht-monoton ändert. Für  $x = 4,7 \%$  kann  $T_S \approx 55 \text{ K}$  bestimmt werden.

Mit weiter steigender Co-Konzentration lassen sich keine strukturellen und magnetischen Phasenübergänge bestimmen. Für  $x = 5,6 \%$  zeigen sich jedoch zunächst wieder geringere Absolutwerte des Seebeck-Koeffizienten. Abbildung 5.14b zeigt die Messungen von  $S$  in Abhängigkeit der Temperatur für die  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ -Proben im Bereich der optimalen Dotierung und im überdotierten Bereich. Für  $x = 5,6 \%$  liegt das Minimum bei  $S \approx -16 \mu\text{V/K}$  und  $T \approx 150 \text{ K}$ . Dahingegen zeigt die optimal dotierte Probe ( $x = 6 \%$ ) einen ungefähr um eine Größenordnung erhöhten Absolutwert. Bereits bei Raumtemperatur ergibt sich ein Seebeck-Koeffizient von ungefähr  $-60 \mu\text{V/K}$ , welcher (absolut) mit sinkender Temperatur auf bis zu  $S \approx -90 \mu\text{V/K}$  im Minimum bei  $T \approx 135 \text{ K}$  ansteigt. Im überdotierten Bereich ( $x = 7,5 \%$ ) fällt der Absolutwert jedoch wieder in den Bereich der unterdotierten Proben ab. Für diese

Co-Konzentration befindet sich das Minimum bei  $S \approx -13 \mu\text{V/K}$  und  $T \approx 175 \text{ K}$ .

Abbildung 5.15a zeigt die Seebeck-Koeffizienten aller gemessener Co-Konzentrationen gemeinsam als Funktion der Temperatur. Bis auf die undotierte Probe mit  $x = 0$  sowie die optimal dotierte Probe mit  $x = 6 \%$  befinden sich alle Graphen in einem ähnlichen Bereich absoluter Werte von  $S$ , jedoch unterscheiden sich die Temperaturverläufe und Positionen der Minima. Dahingegen zeigt die optimal dotierte Probe ( $x = 6 \%$ ) sehr große Absolutwerte von  $S$ . Ein ähnliches Verhalten wurde in Polykristallen von  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  beobachtet [198, 210]. Die entsprechenden Messungen des Seebeck-Koeffizienten aus Ref. [210] für verschiedene F-Konzentrationen sind in Abbildung 5.15b dargestellt. Wie bereits oben beschrieben, zeigt die undotierte Probe ebenfalls einen Wechsel des Vorzeichens. Die optimal dotierte Probe ( $x = 0,1$  in Abbildung 5.15b) erreicht ebenfalls Absolutwerte, welche eine Größenordnung über denen von  $\text{LaFeAsO}$  liegen. Der Temperaturverlauf ähnelt dabei der Messung an der optimal dotierten  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ -Probe. Jedoch zeigt sich in  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  im unterdotierten Bereich ein sogar noch größerer Absolutwert von  $S$ , was im Gegensatz zu den hier vorgestellten Messungen steht, in denen die Absolutwerte der optimal dotierten Probe eindeutig eine Anomalie darstellen.

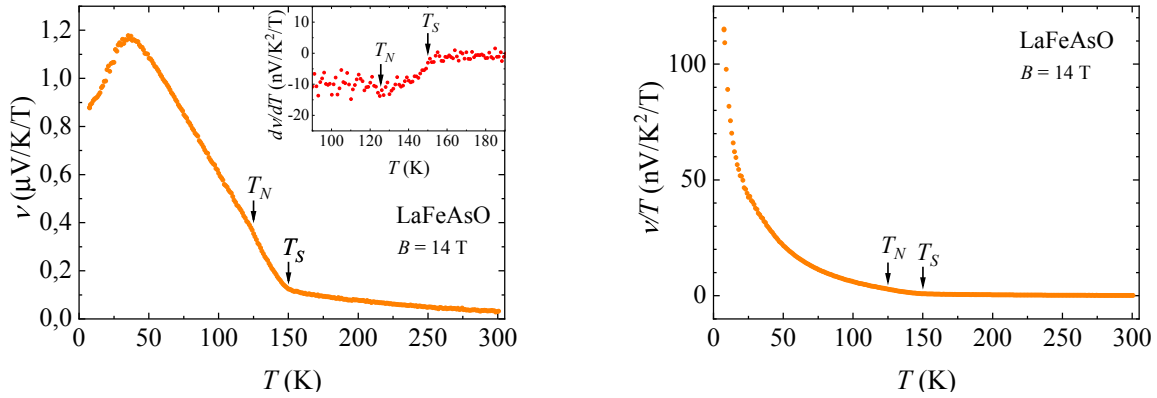
Eine weitere Analyse der Daten ist im Rahmen eines Einband-Modells (vgl. Kapitel 2.1.4) schwierig, da es sich hier mit Sicherheit um ein Mehrband-System handelt. Der nicht-monotone Dotierverlauf des Absolutwertes von  $S$  sowie die Position des Maximums lässt sich mit vorhandenen theoretischen Transportmodellen der eisenbasierten Supraleiter nicht erklären. Da solche Modelle meist von zwei Bändern ausgehen, wird stets eine monotone Abhängigkeit dieser Eigenschaften von der Dotierung vorhergesagt [57, 214]. Genaue Verläufe von temperaturabhängigen Seebeck-Daten können allgemein nur unter Berücksichtigung von vielen Bändern bzw. von genauen Kenntnissen der Bandstruktur modelliert werden [215, 216].

### 5.3.3 Nernst-Effekt in $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$

In den zwei folgenden Abschnitten sollen die Messungen des Nernst-Effekts sowie der Wärmeleitfähigkeit an  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  vorgestellt und ausgewertet werden. Ein besonderer Fokus liegt dabei auf dem Vergleich der Daten mit Messungen in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$ , einem Elektron-dotierten Vertreter der 122-Familie, welche im Rahmen der Doktorarbeit von Frank Steckel [73] (Rh-Dotierstufen 0, 4, 6,1, 8,7 und 10,7 %) sowie im Rahmen meiner Masterarbeit [217] (Rh-Dotierstufen 0, 1,2 und 2,5 %) am IFW Dresden durchgeführt wurden. Alle hier gezeigten temperaturabhängigen Nernst-Messungen wurden durch Anlegen eines Temperaturgradienten und Messung der senkrecht dazu entstehenden Spannung innerhalb der  $ab$ -Ebene durchgeführt, während ein Magnetfeld von  $+14 \text{ T}$  bzw.  $-14 \text{ T}$  in  $c$ -Richtung angelegt wurde.

Abbildung 5.16a zeigt den Nernst-Koeffizienten  $\nu = N/B$  als Funktion der Temperatur in undotiertem  $\text{LaFeAsO}$ . Bereits bei Raumtemperatur ist ein Nernst-Koeffizient von ungefähr  $30 \text{ nV/K/T}$  messbar. Mit sinkender Temperatur steigt  $\nu$  stetig an bis zum strukturellen





(a) Nernst-Koeffizient  $\nu$  von LaFeAsO in Abhängigkeit der Temperatur. Im Inset ist die Ableitung  $d\nu/dT$  als Funktion von  $T$  dargestellt. Aus den Extrema des Anstiegs erhält man  $T_S \approx 150$  K und  $T_N \approx 125$  K.

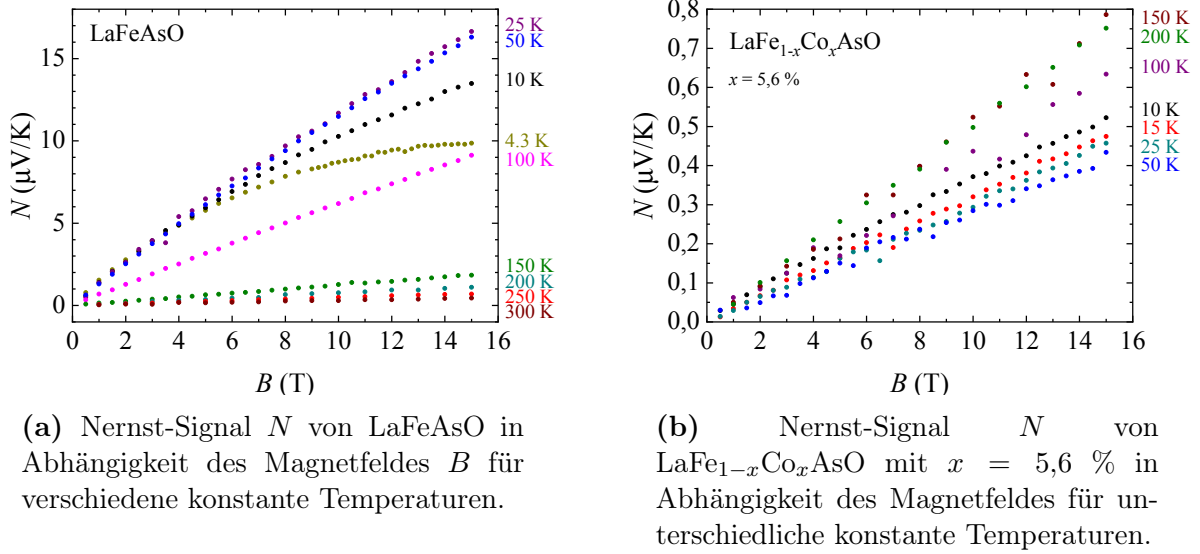
(b) Nernst-Koeffizient von LaFeAsO geteilt durch die Temperatur in Abhängigkeit von  $T$ .

**Abbildung 5.16:** Ergebnisse der Nernst-Effekt-Messungen an LaFeAsO.

Phasenübergang bei  $T_S \approx 150$  K, welcher anhand der Ableitung  $d\nu/dT$  ermittelt werden kann (vgl. Inset in Abbildung 5.16a). Der Beginn des Abfalls der Ableitung befindet sich bei  $T \approx 150$  K und wird als struktureller Phasenübergang, das mit weiterer Abkühlung folgende Minimum bei  $T \approx 125$  K, welches einem Wendepunkt in  $\nu(T)$  entspricht, als magnetischer Phasenübergang identifiziert. Diese Temperaturen stimmen mit den mittels Messungen des Seebeck-Koeffizienten erhaltenen Werten überein (vgl. Abschnitt 5.3.2). Nach dem strukturellen Phasenübergang steigt der Nernst-Koeffizient wesentlich stärker um bis zu eine Größenordnung in der SDW-Phase an. Es bildet sich ein Maximum von  $\nu \approx 1,2 \mu\text{V/K/T}$  bei  $T \approx 35$  K, worauf mit weiterem Abkühlen der Wert auf  $\nu \approx 0,9 \mu\text{V/K/T}$  bei  $T \approx 7,5$  K fällt. In Abbildung 5.16b ist der Nernst-Koeffizient geteilt durch die Temperatur in Abhängigkeit von  $T$  dargestellt. Hier zeigt sich in der SDW-Phase ein steiler werdender Anstieg ohne vorhandenes Maximum um bis zu mehrere Größenordnungen. Dieser starke Anstieg in der SDW-Phase lässt sich durch die veränderte Bandstruktur erklären. Beim magnetischen Übergang kommt es zur Bandrückfaltung (vgl. Abschnitt 5.1), wodurch auch Dirac-Banddispersionen in der Nähe der Fermi-Fläche auftreten können [179–183].

Der Einfluss von Dirac-Fermionen auf den Nernst-Effekt in eisenbasierten Supraleitern kann durch ihre hohe Mobilität  $\mu_e$  verstanden werden. Geht man zum Verständnissgewinn von einem, in LaFeAsO in jedem Fall unvollständigen, Einbandmodell mit linear energieabhängiger Streuzeit aus, so kann man  $\nu$  mit Gleichung 2.126 (vgl. Kapitel 2.1.4) die Abhängigkeit des Nernst-Koeffizienten von der Fermi-Energie  $\epsilon_F$  und der Elektronenmobilität  $\mu_e$  ausdrücken:  $\nu/T \propto \mu_e/\epsilon_F$ . Der Einfluss einer erhöhten Mobilität kann auch anhand der Abhängigkeit des Nernst-Signals  $N$  vom Magnetfeld verdeutlicht werden. Die entsprechenden Messergebnisse



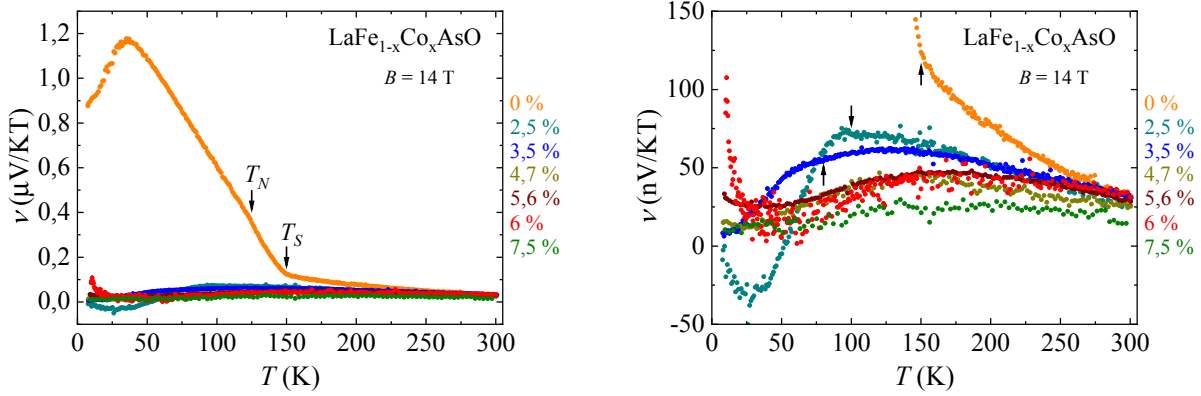


**Abbildung 5.17:** Nernst-Signal in Abhängigkeit des Magnetfeldes in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ . Die entsprechenden Daten der restlichen Co-Dotierstufen sind im Anhang A.2 dargestellt.

sind in Abbildung 5.17a dargestellt. Für hohe Temperaturen zeigt  $N$  ein lineares Verhalten, welches ebenfalls unterhalb von  $T_S$  bis hin zu 100 K bestehen bleibt. Darunter entwickelt sich jedoch eine Abflachung des Verlaufs für hohe Magnetfelder, welche bei 4,3 K in ein Plateau übergeht. Dies stellt den typischen Verlauf eines normalen Nernst-Signals von Ladungsträgern mit hoher Mobilität dar (vgl. Gleichung 2.30 in Abschnitt 2.1.1 sowie die Diskussion der Magnetfeldabhängigkeit des Nernst-Signals in Abschnitt 4.4). Jedoch bedeutet dies nicht, dass die vorherrschenden Ladungsträger in  $\text{LaFeAsO}$  große Mobilitäten aufweisen, was leicht anhand des ansteigenden Verlaufs des spezifischen Widerstands gezeigt werden kann (vgl. Abbildung 5.10a). Vielmehr besitzen die Dirac-Fermionen lediglich ein kleines spektrales Gewicht und können aufgrund ihrer unterdrückten Rückstreuung [218] und den daraus resultierenden unterschiedlichen Streuraten der verschiedenen Bänder zu einem verstärkten Nernst-Koeffizienten führen [181], während Ladungsträger mit geringeren Mobilitäten trotz größerem spektralen Gewicht kaum zu  $\nu$  beitragen, falls sich z.B. die Streuzeit an der Fermi-Energie für diese Bänder kaum ändert (vgl. Abschnitt 2.1.4).

Abbildung 5.17b zeigt  $N(B)$  für  $x = 2,5\%$  stellvertretend für die Proben endlicher Co-Dotierung zum Vergleich. Die restlichen Daten sind im Anhang A.2 dargestellt. Dabei zeigt sich lediglich für  $x = 2,5\%$  bei tiefen Temperaturen innerhalb der nematischen Phase ein negatives Nernst-Signal. Alle anderen Proben zeigen für alle Temperaturen positive Werte von  $N$  sowie fast immer ein lineares Verhalten in Abhängigkeit des Magnetfeldes. Nur innerhalb der supraleitenden Phase zeigt sich für  $x = 6\%$  ein nicht-linearer Verlauf (Abbildung A.2d in Anhang A.2) aufgrund von sich im Temperaturgradienten bewegendem supraleitenden Vortizes (vgl. Abschnitt 2.1.4).

Die temperaturabhängigen Messungen des Nernst-Koeffizienten für alle gemessenen Co-



(a) Nernst-Koeffizient  $\nu$  von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  in Abhängigkeit der Temperatur für alle gemessenen Co-Konzentrationen. Die Phasenübergänge der undotierten Probe sind durch schwarze Pfeile markiert.

(b) Nernst-Koeffizient von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  in Abhängigkeit der Temperatur für alle gemessenen Co-Konzentrationen. Markiert sind die Temperaturen der strukturellen Phasenübergänge (schwarze Pfeile).

**Abbildung 5.18:** Ergebnisse der Nernst-Effekt-Messungen an  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ .

Konzentrationen von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  sind in Abbildung 5.18a dargestellt. Mit endlicher Co-Dotierung wird das riesige Nernst-Signal in der nematischen Phase unterdrückt. Für eine bessere Sichtbarkeit der gemessenen Temperaturverläufe an den dotierten Proben ist in Abbildung 5.18b ein Ausschnitt der Daten ohne Berücksichtigung des Tieftemperaturbereichs der undotierten Probe gezeigt. Mit einer Co-Konzentration von  $x = 2,5\%$  ( $T_S \approx 100\text{ K}$  und  $T_N \approx 60\text{ K}$ , aus Seebeck-Messungen gewonnen) ändert sich der Wert des Nernst-Koeffizienten bei Raumtemperatur im Vergleich zur undotierten Probe nicht. Mit abfallender Temperatur steigt  $\nu$  stetig an, zeigt jedoch keine Reaktion auf den strukturellen Phasenübergang bei  $T_S$  (markiert durch einen schwarzen Pfeil in Abbildung 5.18b), sondern ein Maximum von  $\nu \approx 75\text{ nV/KT}$  bei  $T \approx 95\text{ K}$  zwischen  $T_S$  und  $T_N$ . Es folgt ein steiler Abfall, ohne Hinweis auf  $T_N$  und ein anschließender Vorzeichenwechsel unterhalb von  $T_N$ . Wie bereits oben erwähnt, ist dies die einzige Probe der Dotierreihe welche einen negativen Verlauf für tiefe Temperaturen zeigt.

Für  $3,5\%$  ( $T_S \approx 80\text{ K}$  und  $T_N \approx 35\text{ K}$ ) weist  $\nu$  keinerlei Reaktion auf die Phasenübergänge auf. Für diese Co-Konzentration entwickelt sich jedoch beim Abkühlen von Raumtemperatur ein breites Maximum von  $\nu$  bei rund  $60\text{ nV/KT}$  und  $120\text{ K}$ , bevor es zum strukturellen Phasenübergang kommt. Unterhalb von  $T_S$  zeigt sich ein Abfall von  $\nu$  bis hin zu einer Abflachung bei tiefen Temperaturen.

Mit einer Dotierung von  $x = 4,7\%$  ( $T_S \approx 55\text{ K}$ ) steigt die Position des Maximums auf  $\nu \approx 45\text{ nV/KT}$  und  $T \approx 150\text{ K}$  an, wobei jedoch der Absolutwert von  $\nu$  für alle  $T$  etwas geringer ist. Der Temperaturverlauf fällt anschließend bis zu einem Minimum bei  $T \approx 25\text{ K}$  ab und weist einen leichten Anstieg bei tiefen Temperaturen auf. Letzteres Merkmal findet man auch in den höheren Dotierstufen. Von der undotierten Probe unterscheiden sich die Verläufe der

unterdotierten Co-Konzentrationen vor allem durch ihr Verhalten in der nematischen Phase.

Für  $x = 5,6 \%$  zeigt sich beim Abkühlen von Raumtemperatur ebenfalls ein breites Maximum bei  $\nu \approx 45 \text{ nV/KT}$  und  $T \approx 150 \text{ K}$  und für tiefe Temperaturen ein Anstieg von  $\nu$ . Die optimal dotierte Probe ( $x = 6 \%$ ) besitzt ein noch breiteres Maximum bei  $\nu \approx 45 \text{ nV/KT}$  und  $T \approx 170 \text{ K}$  und entwickelt unterhalb eines Minimums bei  $T \approx 50 \text{ K}$  einen steilen Anstieg von bis zu einer Größenordnung. Im überdotierten Bereich bei  $x = 7,5 \%$  zeigt sich insgesamt ein Abfall des Absolutwertes von  $\nu$  für alle Temperaturen verglichen mit den anderen Dotierstufen, zudem ein breites Maximum bei  $T \approx 150 \text{ K}$  und ebenfalls eine Abflachung bei tiefen Temperaturen.

Die leichten Anstiege der Dotierstufen  $x = 4,7$  und  $5,6 \%$  mit sinkender Temperatur sowie der riesige gemessene Anstieg in der optimal dotierten Probe deuten zunächst auf einen oft diskutierten Einfluss supraleitender Fluktuationen, welche dem supraleitenden Phasenübergang vorausgehen, auf den Nernst-Effekt hin [53]. Gegen dieses Szenario spricht jedoch das Einsetzen des Anstieges bei über  $50 \text{ K}$  für  $x = 6 \%$  trotz des relativ geringen  $T_c$  bei ungefähr  $10,5 \text{ K}$  sowie dem, trotz des Vorhandenseins eines supraleitenden Phasenübergangs (vgl. für beides Abschnitt 5.3.1), fehlenden Anstieg von  $\nu$  für  $x = 7,5 \%$ .

Allen untersuchten Proben gemein ist jedoch der bereits bei Raumtemperatur große Wert von  $\nu$  sowie der sich zunächst mit sinkender Temperatur entwickelnde stetige Anstieg. Generell kann ein großer Nernst-Koeffizient durch erhöhte Ladungsträgermobilitäten verstanden werden (vgl. Kapitel 2.1.4), weswegen die vermuteten Dirac-Bandkreuzungen in der Nähe der Fermi-Energie den hohen Nernst-Koeffizienten in der nematischen Phase von  $\text{LaFeAsO}$  erklären (siehe oben). Für steigende Ladungsträger-Dotierung sollte sich das Fermi-Niveau jedoch von dieser Bandkreuzung entfernen, welche somit nicht mehr dominierend zum thermoelektrischen Transport beitragen kann. Aufgrund der fast halbmimetallischen Verläufe des spezifischen Widerstandes (vgl. Abschnitt 5.3.1) kann man außerdem auch in den dotierten Proben von keiner hohen Mobilität der Ladungsträger ausgehen.

In einem Multiband-System kann es außerdem auch dann zu einem endlichen Nernst-Effekt kommen, wenn der Hall-Effekt aufgrund von Ambipolarität sehr klein ist (vgl. Kapitel 2.1.4), da sich die Beiträge unterschiedlicher Ladungsträger zum Hall-Effekt aufheben, während der Nernst-Effekt in diesem Fall erhöht wird. Für hohe Temperaturen zeigen zwar alle untersuchten  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ -Proben einen kleinen Hall-Koeffizienten, jedoch steigt dieser mit sinkender Temperatur an (siehe Abbildung 5.12b) und würde deshalb den Anstieg des Nernst-Koeffizienten beim Abkühlen nicht erklären.

Dieses universelle Phänomen des erhöhten Nernst-Koeffizienten in einem großen Bereich des Phasendiagramms wurde bereits in den Nernst-Effekt-Daten an  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  beobachtet und mit dem potentiellen Einfluss nematischer Fluktuationen auf den Nernst-Koeffizienten zurückgeführt [73, 217]. Aus diesem Grund soll im Folgenden eine theoretische Betrachtung der Bandstruktur eisenbasierter Supraleiter im Rahmen eines minimalen Modells unter dem

Einfluss einer nematischen Kopplung vorgestellt werden.

### Theoretisches Modell

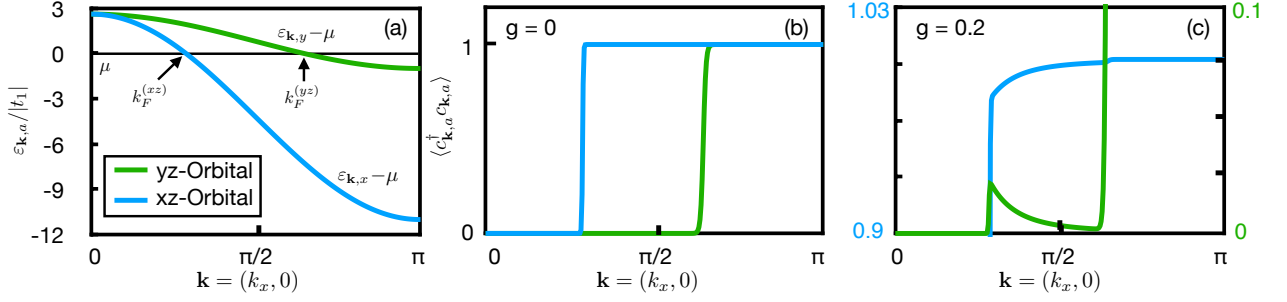
Die in diesem Abschnitt vorgestellte Herleitung des Nernst-Koeffizienten im Rahmen eines minimalen Modells eisenbasierter Supraleiter wurde von Steffen Sykora am IFW Dresden erstellt und numerisch ausgewertet.

Betrachtet wird ein *tight binding*-Modell, bestehend aus zwei Bändern, wobei die Elektronen das  $d_{xz}$ - und das  $d_{yz}$ -Orbital der Fe-Atome auf einem quadratischen Gitter besetzen können. Beschrieben wird dies durch den folgenden Hamilton-Operator [219]:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}, ab, \sigma} \left( t_{\mathbf{i}\mathbf{j}}^{ab} c_{\mathbf{i}a\sigma}^\dagger c_{\mathbf{j}b\sigma} + \text{h.c.} \right) - \mu \sum_{\mathbf{i}, a} n_{\mathbf{i}, a} - \frac{g}{2} \sum_{\mathbf{i}} (n_{\mathbf{i}, xz} - n_{\mathbf{i}, yz})^2 = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_g. \quad (5.11)$$

Dieses minimale Modell erlaubt die Beschreibung der grundlegenden Bandstruktur eisenbasierter Supraleiter und führt zu einem nematisch geordneten Grundzustand [178, 219].  $a, b = xz, yz$  beschreiben die Orbitale,  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  den Spin-Index.  $n_{\mathbf{i}, a} = \sum_{\sigma} c_{\mathbf{i}a\sigma}^\dagger c_{\mathbf{i}a\sigma}$  ist die Besetzungszahl des Orbitals  $a$  auf dem Gitterplatz  $\mathbf{i}$ . Der erste Term in Gleichung 5.11 beschreibt die kinetische Energie der Leitungselektronen. Um eine realistische Basis-Bandstruktur von eisenbasierten Supraleitern zu erhalten, werden im folgenden die Hüpff-Parameter  $t_{\mathbf{i}\mathbf{j}}^{ab}$  aus Ref. [220] verwendet. Das führt zur Entstehung einer lochartigen Fermitasche beim  $\Gamma$ -Punkt und jeweils einer elektronenartigen Fermi-Tasche am  $X$ - und  $Y$ -Punkt in der Brillouin-Zone. Der Einfluss des chemischen Potentials  $\mu$  wird durch den zweiten Term in Gleichung 5.11 beschrieben. Eine Variation von  $\mu$ , welche experimentell zum Beispiel durch Dotierung oder Druck erzeugt werden kann, führt dabei zu einer Veränderung der Ausdehnungen der loch- und elektronenartigen Fermi-Taschen. Der dritte Term in Gleichung 5.11 berücksichtigt die nematischen Fluktuationen. Aufgrund des negativen Vorzeichens senkt dieser Term die Energie proportional zur nematischen Kopplungsstärke  $g$  im Falle einer ungleichen Besetzung der beiden Orbitale  $d_{xz}$  und  $d_{yz}$  auf einem Gitterplatz  $\mathbf{i}$ . Somit wird ein Zustand favorisiert, in welchem auf einem Gitterplatz, auf dem ein Orbital besetzt ist, das entsprechende senkrechte Orbital gemieden wird. Diese effektive Elektron-Elektron-Wechselwirkung beschreibt zusammen mit dem ersten Term die grundlegenden nematischen Eigenschaften. Da die Rotationssymmetrie in diesem Hamilton-Operator nicht gebrochen ist, beschreibt er ein System, dass sich nahe einer nematischen Instabilität, jedoch nicht in einer nematischen Phase befindet.

Dieses Modell wurde bereits mittels *Random-Phase-Approximation* (RPA) [220] sowie mit determinanten Quanten-Monte-Carlo-Methoden untersucht [219]. Im Rahmen der RPA werden dabei mehrere Ordnungen abhängig vom Wert des chemischen Potentials vorhergesagt. Zwischen  $\mu/t_1 = 0,2$  und  $\mu/t_1 = 2,5$  ( $t_1$  ist das intra-orbitale nächste-Nachbarn-Hüpff-Matrixelement) wird eine uniforme nematische Ordnung für  $g/t_1 \approx 1,7$  vorhergesagt. Außerdem erhält man für  $\mu/t_1 > 2,5$  eine Streifen-Ordnung mit den Wellenvektoren  $(0, \pi)$  und  $(\pi, 0)$ , und für



**Abbildung 5.19:** Dispersion und Besetzungszahlen der Elektronen für die Orbitale  $d_{xz}$  (grüne Linien) und  $d_{yz}$  (blaue Linien) in Abhängigkeit von  $k_x$  für  $k_y = 0$  und ein festes chemisches Potenzial  $\mu = 1, 2$ . **(a)**  $\epsilon_{\mathbf{k},a} - \mu$ , errechnet aus den Gleichungen 5.13 und 5.14. **(b)** Orbitale Besetzungszahlen (pro Spin) für  $g = 0$  und  $k_B T = 0,02$ . Da keine Wechselwirkungen bestehen, zeigen sich hier normale Fermi-Verteilungen. **(c)** Orbitale Besetzungszahlen für  $g = 0,2$  und  $k_B T = 0,02$ . Um den Unterschied hervorzuheben, werden hier vergrößerte Skalen im Bereich 0,9 bis 1,03 für das  $d_{xz}$ -Orbital und 0 bis 0,1 für das  $d_{yz}$ -Orbital gezeigt.

$\mu/t_1 < 0,2$  eine antiferroorbitale Ordnung.

Zunächst kann der Term der kinetischen Energie im Halmilton-Operator in Gleichung 5.11,  $\mathcal{H}_0$ , mithilfe einer Fourier-Transformationen in den Impuls-Raum überführt werden, was zu folgendem Ausdruck führt:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[ (\epsilon_{\mathbf{k},x} - \mu) c_{\mathbf{k}x\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}x\sigma} + (\epsilon_{\mathbf{k},y} - \mu) c_{\mathbf{k}y\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}y\sigma} + V_{\mathbf{k}}^t (c_{\mathbf{k}x\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}y\sigma} + c_{\mathbf{k}y\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}x\sigma}) \right]. \quad (5.12)$$

Dabei sind:

$$\epsilon_{\mathbf{k},x} = 2t_1 \cos k_x - 2t_2 \cos k_y + 2t_3 [\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y)], \quad (5.13)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k},y} = 2t_1 \cos k_y - 2t_2 \cos k_x + 2t_3 [\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y)], \quad (5.14)$$

$$V_{\mathbf{k}}^t = 2t_4 [-\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y)]. \quad (5.15)$$

Die Elemente der Hüpf-Matrix werden entsprechend Ref. [220] in Bezug auf  $t_1$  festgelegt als  $t_1$ ,  $t_2/t_1 = 1,5$ ,  $t_3/t_1 = 1,2$  und  $t_4/t_1 = 0,95$ . Im Folgenden werden alle Energien bezogen auf  $t_1$  angegeben. Die Dispersionen  $\epsilon_{\mathbf{k},x}$  und  $\epsilon_{\mathbf{k},y}$  sind für bestimmte Schnitte im  $\mathbf{k}$ -Raum in Abbildung 5.19a dargestellt, wobei vor allem die durch den Schnitt mit dem chemischen Potenzial entstehenden loch- und elektronenartigen Fermi-Taschen sichtbar werden.

Der Wechselwirkungsterm in Gleichung 5.11 wird nun mithilfe der *Mean-Field*-Theorie entkoppelt:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{g,MF} \approx & g \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[ \left( n_x - \frac{1}{2} \right) c_{\mathbf{k}x\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}x\sigma} + \left( n_y - \frac{1}{2} \right) c_{\mathbf{k}y\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}y\sigma} \right. \\ & \left. - d_{xy} (c_{\mathbf{k}x\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}y\sigma} + c_{\mathbf{k}y\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}x\sigma}) \right] - gN(n_x^2 + n_y^2 - 2n_h^2), \end{aligned} \quad (5.16)$$

wobei der Parameter  $N$  die Gesamtzahl der  $\mathbf{k}$ -Punkte in der Brillouin-Zone und  $n_x = \langle c_{ix\sigma}^\dagger c_{ix\sigma} \rangle$ ,  $n_y = \langle c_{iy\sigma}^\dagger c_{iy\sigma} \rangle$  und  $n_h = \langle c_{ix\sigma}^\dagger c_{iy\sigma} \rangle$  die Erwartungswerte der lokalen Besetzungszahlen der Orbitale sowie die lokale Hybridisierung beschreiben. Diese Erwartungswerte werden mithilfe des genäherten Hamilton-Operators  $\mathcal{H}_{MF} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{g,MF}$  gebildet und haben konstante Werte für die Gitterplätze  $\mathbf{i}$  und Spins  $\sigma$  wegen der Translations- und Zeitumkehrsymmetrie des ursprünglichen Hamilton-Operators in Gleichung 5.11. Eine spontane Symmetriebrechung des *Mean-Field*-Hamilton-Operators  $\mathcal{H}_{MF}$  wird hierbei nicht berücksichtigt, da die RPA eine orbitale Ordnung nur für größere Werte von  $g$  impliziert [220].

Die Transportkoeffizienten lassen sich im Rahmen dieser Näherung mittels einer Störungstheorie in erster Ordnung im Magnetfeld  $B$  ausdrücken:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 \tau}{N k_B T} \sum_{\mathbf{k}, a, \sigma} v_{xa}^2 n_{\mathbf{k}a} (1 - n_{\mathbf{k}a}) , \quad (5.17)$$

$$\alpha_{xx} = \frac{e \tau}{N (k_B T)^2} \sum_{\mathbf{k}, a, \sigma} v_{xa}^2 (\epsilon_{\mathbf{k},a} - \mu) n_{\mathbf{k}a} (1 - n_{\mathbf{k}a}) , \quad (5.18)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{e^3 \tau^2 B}{\hbar N k_B T} \sum_{\mathbf{k}, a, \sigma} \left( v_{xa}^2 \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k},a}}{\partial k_y^2} - v_{xa} v_{ya} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k},a}}{\partial k_x \partial k_y} \right) n_{\mathbf{k}a} (1 - n_{\mathbf{k}a}) , \quad (5.19)$$

$$\alpha_{xy} = \frac{e^3 \tau^2 B}{\hbar N (k_B T)^2} \sum_{\mathbf{k}, a, \sigma} \left( v_{xa}^2 \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k},a}}{\partial k_y^2} - v_{xa} v_{ya} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k},a}}{\partial k_x \partial k_y} \right) (\epsilon_{\mathbf{k},a} - \mu) n_{\mathbf{k}a} (1 - n_{\mathbf{k}a}) , \quad (5.20)$$

wobei  $\tau$  Streuzeit,  $e$  die Elementarladung und  $n_{\mathbf{k}a} = \langle c_{\mathbf{k}a\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}a\sigma} \rangle$  die Besetzungszahl des Orbitals  $a$  sind. Die Größen  $v_{xa} = \partial \epsilon_{\mathbf{k},a} / \partial k_x$  und  $v_{ya} = \partial \epsilon_{\mathbf{k},a} / \partial k_y$  beschreiben die Komponenten der Fermi-Geschwindigkeit des Orbitals  $a$ . Diese Gleichungen müssen explizit berechnet werden, um den Nernst-Koeffizienten  $\nu$  (mithilfe von Gleichung 2.112) zu bestimmen. Dafür kann man die analytischen Ausdrücke aus den Gleichungen 5.13 und 5.14 verwenden, in welche nur die Werte für  $t_1$ ,  $t_2$ ,  $t_3$  und  $t_4$  einfließen (s. oben). Demzufolge ist die einzige Größe, die von nematischen Fluktuationen beeinflusst wird, die Besetzungszahl  $n_{\mathbf{k}a}$ . Ein Ausdruck für  $n_{\mathbf{k}a}$  kann mittels einer Diagonalisierung des Hamilton-Operators  $\mathcal{H}_{MF}$  erhalten werden. Wegen der bilinearen Struktur der Operatoren in  $\mathcal{H}_0$  und  $\mathcal{H}_{g,MF}$  lassen diese sich in folgender Form schreiben:

$$\mathcal{H}_{MF} = \sum_{\mathbf{k}, a, \sigma} E_{\mathbf{k}a} c_{\mathbf{k}a\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}a\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} V_{\mathbf{k}} \left( c_{\mathbf{k}x\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}y\sigma} + c_{\mathbf{k}y\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}x\sigma} \right) + E_0 , \quad (5.21)$$

wobei folgende Größen mithilfe von Gleichung 5.12 und 5.16 eingeführt wurden:

$$E_{\mathbf{k}a} = \epsilon_{\mathbf{k}a} + g \left( n_a - \frac{1}{2} \right) - \mu , \quad (5.22)$$

$$V_{\mathbf{k}} = V_{\mathbf{k}}^t - g n_h , \quad (5.23)$$

$$E_0 = -g N (n_x^2 + n_y^2 - 2n_h^2) . \quad (5.24)$$

$\mathcal{H}_{MF}$  kann nun mittels neuer fermionischer Operatoren diagonalisiert werden:

$$\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}y\sigma}^\dagger + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}x\sigma}^\dagger, \quad (5.25)$$

$$\beta_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = -v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}y\sigma}^\dagger + u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}x\sigma}^\dagger, \quad (5.26)$$

wobei die  $\mathbf{k}$ -abhängigen Koeffizienten  $u_{\mathbf{k}}$  und  $v_{\mathbf{k}}$  folgende Bedingungen erfüllen müssen:

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{E_{\mathbf{k}x} - E_{\mathbf{k}y}}{\sqrt{(E_{\mathbf{k}x} - E_{\mathbf{k}y})^2 + 4V_{\mathbf{k}}^2}} \right), \quad (5.27)$$

$$v_{\mathbf{k}}^2 = 1 - u_{\mathbf{k}}^2. \quad (5.28)$$

Somit kann der *Mean-Field*-Hamilton-Operator in diagonalen Struktur und in einer Band-Basis geschrieben werden,

$$\mathcal{H}_{MF} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left( E_{\mathbf{k}}^{(e)} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}\sigma} + E_{\mathbf{k}}^{(h)} \beta_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{k}\sigma} \right) + E_0, \quad (5.29)$$

wobei „e“ und „h“ jeweils die Elektronen- und Lochtaschen beschreiben. Die Quasiteilchen-Dispersionen ergeben sich zu

$$E_{\mathbf{k}}^{(e,h)} = \frac{E_{\mathbf{k}x} + E_{\mathbf{k}y}}{2} \pm \sqrt{(E_{\mathbf{k}x} - E_{\mathbf{k}y})^2 + 4V_{\mathbf{k}}^2} \quad (5.30)$$

und beschreiben die echte Bandstruktur, für explizite Berechnungen müssen nur noch die Gleichungen 5.22, 5.23 und 5.13 – 5.15 eingesetzt werden.

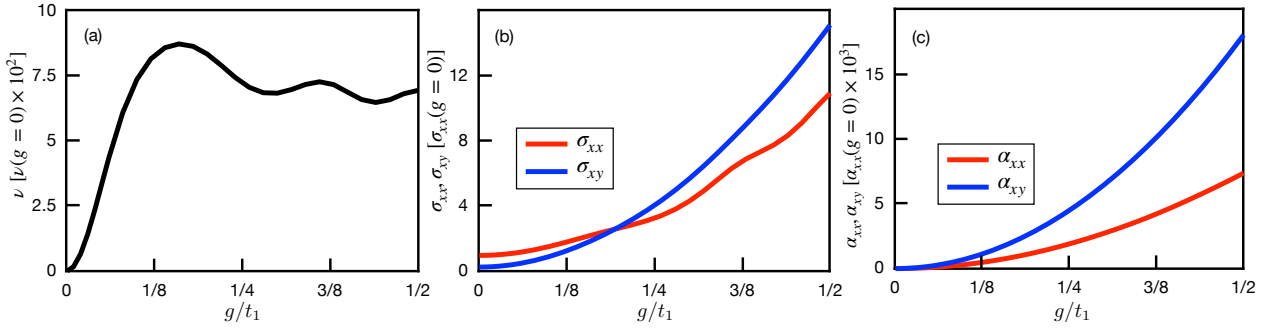
Nun können die Erwartungswerte  $\langle c_{\mathbf{k}a}^\dagger c_{\mathbf{k}a} \rangle$  und  $\langle c_{\mathbf{k}x}^\dagger c_{\mathbf{k}y} \rangle$  bestimmt werden, welche in alle Transportkoeffizienten (Gleichungen 5.17 – 5.20) sowie in die Besetzungszahl-Operatoren  $n_a = (1/N) \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}a}^\dagger c_{\mathbf{k}a} \rangle$  und  $n_h = (1/N) \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}x}^\dagger c_{\mathbf{k}y} \rangle$  einfließen. Mithilfe des diagonalisierten Hamilton-Operators in Gleichung 5.29 lassen sich diese Erwartungswerte einfach bestimmen, indem man die  $c$ -Operatoren mittels der Gleichungen 5.25 und 5.26 mit den  $\alpha$ - und  $\beta$ -Operatoren ersetzt. Die Ergebnisse lassen sich dann mithilfe von Fermi-Funktionen in Abhängigkeit der Dispersionen in Gleichung 5.30 ausdrücken:

$$\langle c_{\mathbf{k}x}^\dagger c_{\mathbf{k}x} \rangle = u_{\mathbf{k}}^2 f(E_{\mathbf{k}}^{(h)}) + v_{\mathbf{k}}^2 f(E_{\mathbf{k}}^{(e)}), \quad (5.31)$$

$$\langle c_{\mathbf{k}y}^\dagger c_{\mathbf{k}y} \rangle = v_{\mathbf{k}}^2 f(E_{\mathbf{k}}^{(h)}) + u_{\mathbf{k}}^2 f(E_{\mathbf{k}}^{(e)}), \quad (5.32)$$

$$\langle c_{\mathbf{k}x}^\dagger c_{\mathbf{k}y} \rangle = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left[ f(E_{\mathbf{k}}^{(e)}) - f(E_{\mathbf{k}}^{(h)}) \right]. \quad (5.33)$$

Hierbei ist  $f(E) = 1/(1 + e^{\beta E})$ . Abbildung 5.19b zeigt jeweils die Besetzungswahrscheinlichkeiten des  $yz$ - und des  $xz$ -Bandes für  $g = 0$  und sehr tiefe Temperaturen. Man sieht eindeutig die Fermi-Kante, welche genau bei jenen Werten von  $\mathbf{k}$  erscheint, bei der die jeweiligen Bänder das chemische Potenzial kreuzen. In Abbildung 5.19c sind die gleichen Größen für  $g = 0,2$ , also eine

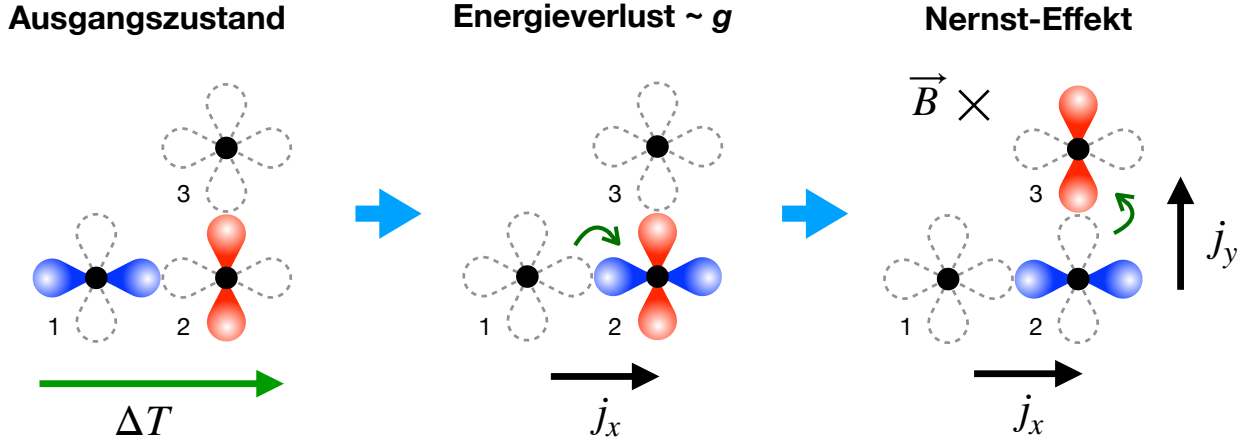


**Abbildung 5.20:** Berechnete Transportkoeffizienten als Funktion der nematischen Kopplung  $g$  für  $\mu = 1$  und  $k_B T = 0,01$ . **(a)** Nernst-Koeffizient  $\nu$  als Funktion von  $g$ . Bereits endliche kleine nematische Kopplungen erhöhen  $\nu$  deutlich. **(b)** Longitudinale ( $\sigma_{xx}$ , rote Linie) und transversale ( $\sigma_{xy}$ , blaue Linie) elektrische Leitfähigkeit als Funktion von  $g$ . Die transversale Leitfähigkeit wird stärker von nematischen Fluktuationen beeinflusst. **(c)** Longitudinaler ( $\alpha_{xx}$ , rote Linie) und transversaler ( $\alpha_{xy}$ , blaue Linie) Peltier Koeffizient in Abhängigkeit der nematischen Kopplung. Auch hier steigt die transversale Komponente wesentlich stärker an.

endliche nematische Kopplung, vergrößert dargestellt. In der Nähe des Fermi-Wellenvektors des  $xz$ -Bandes  $k_F^{(xz)}$  kommt es zu einer verringerten Besetzung der Zustände, während die Besetzung des  $yz$ -Bandes bei  $k_F^{(xz)}$  erhöht wird.  $k_F^{(xz)}$  entspricht jedoch nicht dem Fermi-Wellenvektor des  $yz$ -Bandes  $k_F^{(yz)}$ . Diese neu besetzten Zustände verfügen über Energien deutlich oberhalb von  $\mu$  (vergleiche Abbildung 5.19a). Somit bewirkt eine nematische Kopplung, dass höherenergetische Zustände besetzt werden, während sich gleichzeitig die Besetzung in der Nähe der (ursprünglichen) Fermi-Energie ändert. Das gleiche gilt für die dazu senkrechte Richtung im  $\mathbf{k}$ -Raum, wobei sich jedoch der orbitale Charakter der Bänder vertauscht. Da dies genau solche Zustände betrifft, welche den größten Einfluss auf alle Transportkoeffizienten haben (vgl. Kapitel 2.1), sollte sich die nematische Kopplung deutlich auf selbige auswirken.

Mit der Kenntnis über die Besetzungszahlen in den Gleichungen 5.31 – 5.33 lassen sich die Transportkoeffizienten und daraus der Nernst Koeffizient mit  $\nu = (\sigma_{xx}\alpha_{xy} - \sigma_{xy}\alpha_{xx})/(\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2)$  (Gleichung 2.112) numerisch berechnen. Abbildung 5.20a zeigt  $\nu$  in Abhängigkeit der nematischen Kopplungsstärke  $g$  für ein chemisches Potenzial  $\mu = 1$  und eine geringe Temperatur  $k_B T = 0,01$ . Mit wachsendem  $g$  steigt  $\nu$  im Bereich  $0 < g < 0,2$  sehr stark an, bevor es eine Sättigung erreicht. Für  $g = 1/8$  ist  $\nu$  drei Größenordnungen größer als im Fall  $g = 0$ , was im Inset verdeutlicht wird. Bereits für minimale endliche nematische Kopplungen wird  $\nu$  also signifikant beeinflusst und steigt an. Die Abbildungen 5.20b und 5.20c zeigen die Transportkoeffizienten, also die Bestandteile von  $\nu$ , ebenfalls in Abhängigkeit von  $g$ . Ein Anstieg mit steigendem  $g$  ist hier ebenfalls sichtbar, jedoch ändern sich die Koeffizienten für endliche kleine nematische Kopplungen kaum. Die transversalen Transportkoeffizienten  $\sigma_{xy}$  und  $\alpha_{xy}$  werden stärker von  $g$  beeinflusst als die longitudinalen Größen  $\sigma_{xx}$  und  $\alpha_{xx}$ . Es kommt sogar zur Kreuzung von  $\sigma_{xy}$  und  $\sigma_{xx}$  bei  $g \approx 0,2$ . Diese verschiedenen Abhängigkeiten rufen somit auf-



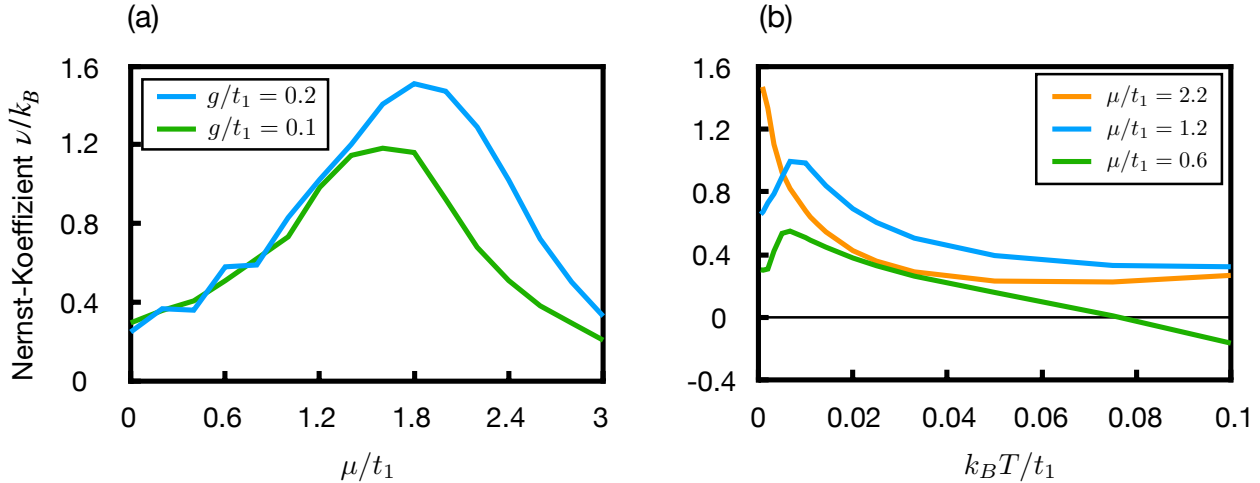


**Abbildung 5.21:** Schematische Darstellung eines durch nematische Fluktuationen erhöhten Nernst-Effekts. Ein Temperaturgradient  $\Delta T$  in  $x$ -Richtung bewirkt ein bevorzugtes Hüpfen der Elektronen im  $d_{xz}$ -Orbital (blau). Ein solches Elektron auf Gitterplatz 1 kann nun auf den Gitterplatz 2 hüpfen, auf welchem bereits das  $d_{yz}$ -Orbital (rot) besetzt ist (mittleres Bild). Dieser Zustand besitzt aufgrund der nematischen Kopplung eine höhere Energie. Diese Situation wird aufgelöst, indem entweder das Elektron im  $d_{xz}$ -Orbital weiter in  $x$ -Richtung, oder das Elektron im  $d_{yz}$ -Orbital in  $y$ -Richtung hüpfte. Die entsprechende Richtung wird dabei aufgrund des orbitalen Charakters bevorzugt. Ist ein externes Magnetfeld angelegt, wird das Hüpfen in  $y$ -Richtung durch die Lorentz-Kraft begünstigt (rechtes Bild) und es entsteht ein transversaler Strom.

grund der unterschiedlichen Einflüsse auf den Zähler und Nenner in  $\nu$  den oben beschriebenen, zunächst sehr starken Anstieg mit anschließender Sättigung hervor.

Der starke Einfluss nematischer Fluktuationen auf die transversalen Transportkoeffizienten kann qualitativ mithilfe der Gleichungen 5.19 und 5.20 verstanden werden. Lediglich die Besetzungszahlen  $n_{ka}$  werden durch  $g$  beeinflusst. Der Faktor  $n_{ka}(1 - n_{ka})$  ist dabei für  $g = 0$  nur in einem kleinen Bereich um den zugehörigen Fermi-Wellenvektor  $k_F^{(a)}$  verschieden von Null. Für  $g \neq 0$  verändert sich, wie oben beschrieben und anhand von Abbildung 5.19b und 5.19c dargestellt, die Besetzung der Zustände. Dies führt zu einer makroskopischen Anzahl von  $\mathbf{k}$ -Punkten, an denen  $n_{ka}(1 - n_{ka})$  verschiedenen von Null ist, wodurch wesentlich mehr Zustände zu den Transportkoeffizienten beitragen.

Die endliche nematische Kopplung bewirkt also im  $\mathbf{k}$ -Raum einen von Fluktuationen getriebenen Drift der Ladungsträger von einem besetzten zu einem unbesetzten Orbital, wobei beide senkrecht zueinander orientiert sind. Aufgrund der involvierten höherenergetischen Zustände bewirkt dies eine starke Änderung der transversalen Transportkoeffizienten. Dieser Prozess ist schematisch in Abbildung 5.21 dargestellt. Ein Hüpfen entlang der  $x$ -Richtung wird z.B. durch einen Temperaturgradienten hervorgerufen. Dies kann zu einem Zustand führen, in welchem auf dem gleichen Gitterplatz beide Orbitale besetzt sind, wodurch sich die Energie laut Gleichung 5.11 um einen Wert der Größenordnung von  $g$  erhöht. Die Energie kann entweder durch weiteres Hüpfen entlang der  $x$ -Richtung oder durch Entfernen des Elektrons im  $d_{yz}$ -



**Abbildung 5.22:** Berechneter Nernst-Koeffizient unter dem Einfluss einer Variation des chemischen Potentials  $\mu$  sowie der Temperatur  $T$ . **(a)** Nernst-Koeffizient in Abhängigkeit von  $\mu$  für zwei verschiedene Werte von  $g$  bei konstanter Temperatur  $k_B T = 0,01$ . **(b)** Nernst-Koeffizient als Funktion der Temperatur für verschiedene Werte von  $\mu$  und festem  $g = 0,1$ .

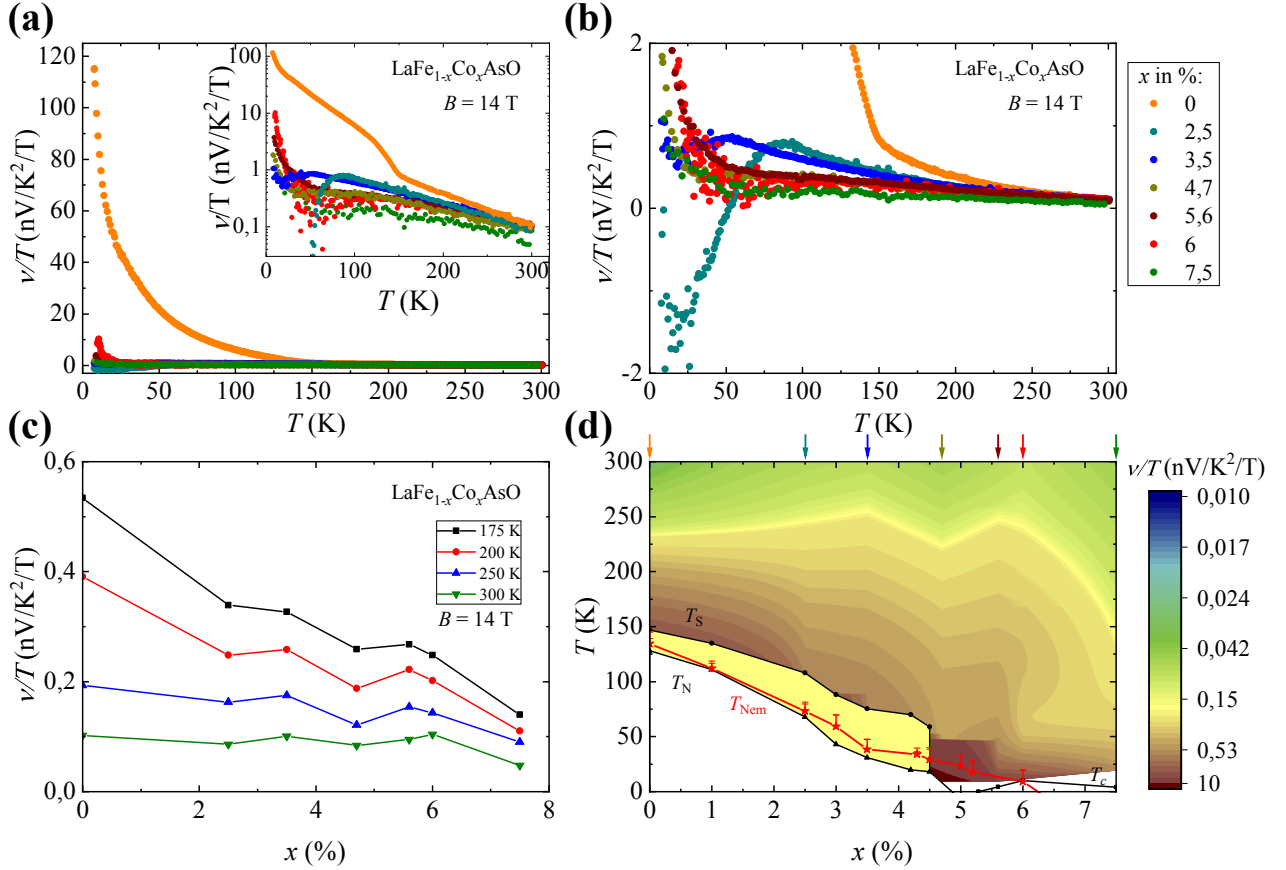
Orbital wieder abgesenkt werden. Letzteres Elektron hüpft aufgrund des orbitalen Charakters bevorzugt parallel zur  $y$ -Achse. Aufgrund der Symmetriebrechung durch ein in  $z$ -Richtung angelegtes externes Magnetfeld  $B$  wird bei dieser Bewegung die (positive)  $y$ -Richtung präferiert. Dadurch wird der transversale Transport und insbesondere der Nernst-Effekt verstärkt.

Schließlich können auch noch die verbleibenden Parameter variiert und deren Einfluss auf den Nernst-Koeffizienten analysiert werden. Abbildung 5.22a zeigt  $\nu$  in Abhängigkeit des chemischen Potentials  $\mu$  für eine feste Temperatur  $k_B T = 0,01$  und zwei verschiedene nematische Kopplungsstärken. Dabei kann  $\mu$  als ein Maß für die Elektronen-Dotierung betrachtet werden. Es zeigt sich in beiden Fällen ein Maximum bei  $\mu \approx 1,8$ . In Abbildung 5.22b ist der Nernst-Koeffizient in Abhängigkeit der Temperatur für  $g = 0,1$  und verschiedene Werte des chemischen Potentials dargestellt. Es zeigen sich ebenfalls Maxima von  $\nu$  in Abhängigkeit der Temperatur, wobei die Temperaturen der Maxima für den optimal dotierten Fall am höchsten sind.

## Auswertung

Mithilfe des theoretischen Modells in Abschnitt 5.3.3 konnte gezeigt werden, dass der Nernst-Effekt sensitiv auf nematische Fluktuationen reagiert und in ihrer Gegenwart eine nicht-monotone Abhängigkeit vom chemischen Potenzial aufweisen sollte (vgl. Abbildung 5.22a). Im Folgenden soll der Fokus deshalb auf der Abhängigkeit des Nernst-Koeffizienten von der Dotierung liegen.

Abbildung 5.23a zeigt  $\nu/T$  in Abhängigkeit der Temperatur für alle Co-Konzentrationen in linearer und semi-logarithmischer Darstellung (Inset). Hier wird der Temperaturverlauf von  $\nu/T$  betrachtet, womit die intrinsische Abhängigkeit des Nernst-Koeffizienten von der Tem-



**Abbildung 5.23:** Nernst-Koeffizient in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  geteilt durch die Temperatur in Abhängigkeit von  $T$  und  $x$ . Alle Daten wurden innerhalb der  $ab$ -Ebene mithilfe eines Magnetfeldes  $B = 14 \text{ T}$  in  $c$ -Richtung aufgenommen. **(a)**  $\nu/T$  in Abhängigkeit der Temperatur in normaler und semi-logarithmischer Darstellung (Inset). **(b)** Vergrößerung der Daten aus Abbildung (a). **(c)**  $\nu/T$  in Abhängigkeit der Co-Konzentration  $x$  für ausgewählte Temperaturen. **(d)** Farbkodiertes Phasendiagramm von  $\nu/T$  in Abhängigkeit von  $T$  und  $x$ . Die entsprechend gefärbten Pfeile am oberen Rand markieren die gemessenen Dotierstufen.  $T_S$ ,  $T_N$ ,  $T_c$  und  $T_{\text{Nem}}$  stammen aus Ref. [208].

peratur (vgl. Kapitel 2.1.4) berücksichtigt wird. Zur besseren Unterscheidung der einzelnen Kurven ist in Abbildung 5.23b eine Vergrößerung der Daten endlicher Dotierstufen dargestellt. Außerhalb der nematischen Phase zeigen die Temperaturverläufe von  $\nu/T$  keinerlei Maxima. Für  $x = 0 \%$ ,  $x = 2,5 \%$ ,  $x = 3,5 \%$  und  $x = 4,7 \%$  zeigen sich, wie in Abschnitt 5.3.3 beschrieben, sehr unterschiedliche Verläufe unterhalb von  $T_S$ . Auf eine genaue Analyse von  $\nu/T$  unterhalb von  $T_S$  soll an dieser Stelle jedoch verzichtet werden, da die Bildung von zufälligen Domänen und die damit verbunden unterschiedlichen Einflüsse auf den teils sehr anisotropen Nernst-Koeffizienten genaue Interpretationen verhindern (vgl. Abschnitt 5.2). Umso erstaunlicher sind die universell großen Werte von  $\nu/T$  bei Raumtemperatur und die starken Anstiege in der tetragonalen Phase, welche  $T_S$  voraus gehen. Dieses Verhalten bleibt auch nach Verschwinden des nematischen Phasenübergangs für höhere Dotierstufen erhalten. Für  $x = 5,6 \%$  und  $x = 6 \%$  steigt der hohe Wert von  $\nu/T$  bei Raumtemperatur mit sinkender Temperatur

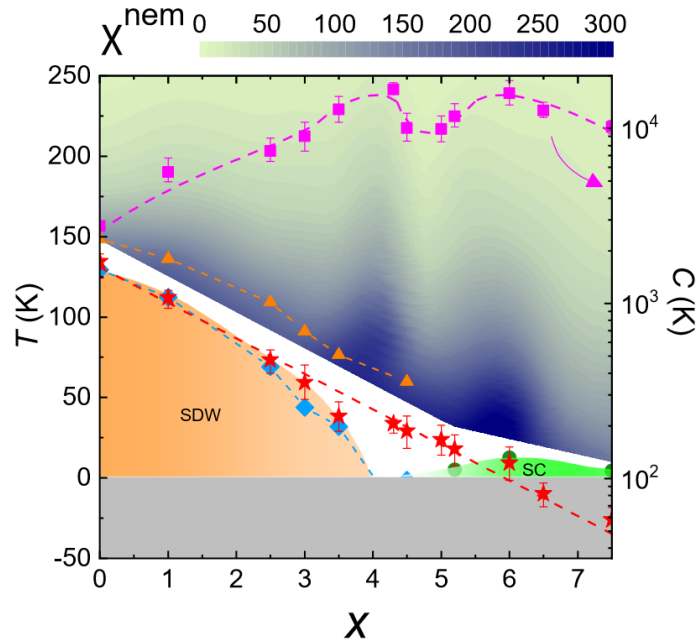
monoton an (bis auf einen etwas flacheren Bereich bei tieferen Temperaturen) und entwickelt schließlich einen verstärkten Anstieg unterhalb von  $T \approx 50$  K. Ein ähnlicher Temperaturverlauf ist in der überdotierten Probe mit  $x = 7,5$  % sichtbar, jedoch ist hier der Wert von  $\nu/T$  insgesamt etwas geringer.

Abbildung 5.23c zeigt Werte von  $\nu/T$  in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  in Abhängigkeit der Dotierung  $x$  für verschiedene ausgewählte Temperaturen. Hier ist ein nicht-monotoner Dotierungsverlauf sichtbar. Der zunächst starke Abfall von der undotierten hin zu den endlich dotierten Proben entwickelt ein Plateau und fällt erst im überdotierten Bereich wieder ab. In Abbildung 5.23d wird ein farbkodiertes Phasendiagramm der  $\nu/T$ -Werte in Abhängigkeit der Temperatur und der Dotierung dargestellt. In dieser Darstellung ist deutlich eine Erhöhung von  $\nu/T$  über dem supraleitenden Dom sichtbar und ein doppeltes Maximum deutet sich an. An dieser Stelle muss auf die relativen Fehler des Absolutwertes von  $\nu$  hingewiesen werden, welche im Bereich 30 – 55 % liegen, jedoch nicht von der Temperatur abhängen, da sie aus der endlichen Ausdehnung der Klebestellen des Thermoelements resultieren (vgl. Abschnitt 3.3). Wiederholte Kontaktierungen an identischen Proben zeigen jedoch kaum eine Abweichung des Absolutwertes und selbst für unterschiedliche Proben gleicher Komposition weist der Nernst-Koeffizient in der tetragonalen Phase nahezu identische Werte auf [217], weshalb die realen Fehler als wesentlich geringer eingeschätzt werden können.

Dieses ungewöhnliche Verhalten in Abhängigkeit von der Dotierung weist eine erstaunliche Ähnlichkeit mit Messungen des Elasto-Widerstands an  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ -Einkristallen (Teil der gleichen Serie wie die hier untersuchten Proben) auf, welche von Xiaochen Hong im IFW Dresden durchgeführt wurden [208]. Wie bereits in Abschnitt 5.2 beschrieben, stellt der Elasto-Widerstand die etablierte Methode zum Nachweis nematischer Fluktuationen dar. Das entsprechende Phasendiagramm der extrahierten nematischen Suszeptibilität von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  in Abhängigkeit der Temperatur  $T$  und der Dotierung  $x$  aus Ref. [208] ist in Abbildung 5.24 dargestellt. Hier zeigt sich ein doppeltes Maximum der nematischen Suszeptibilität, eines in der Region des Phasendiagramms, in welcher der strukturelle Phasenübergang verschwindet, und ein zweites über dem supraleitenden Dom.

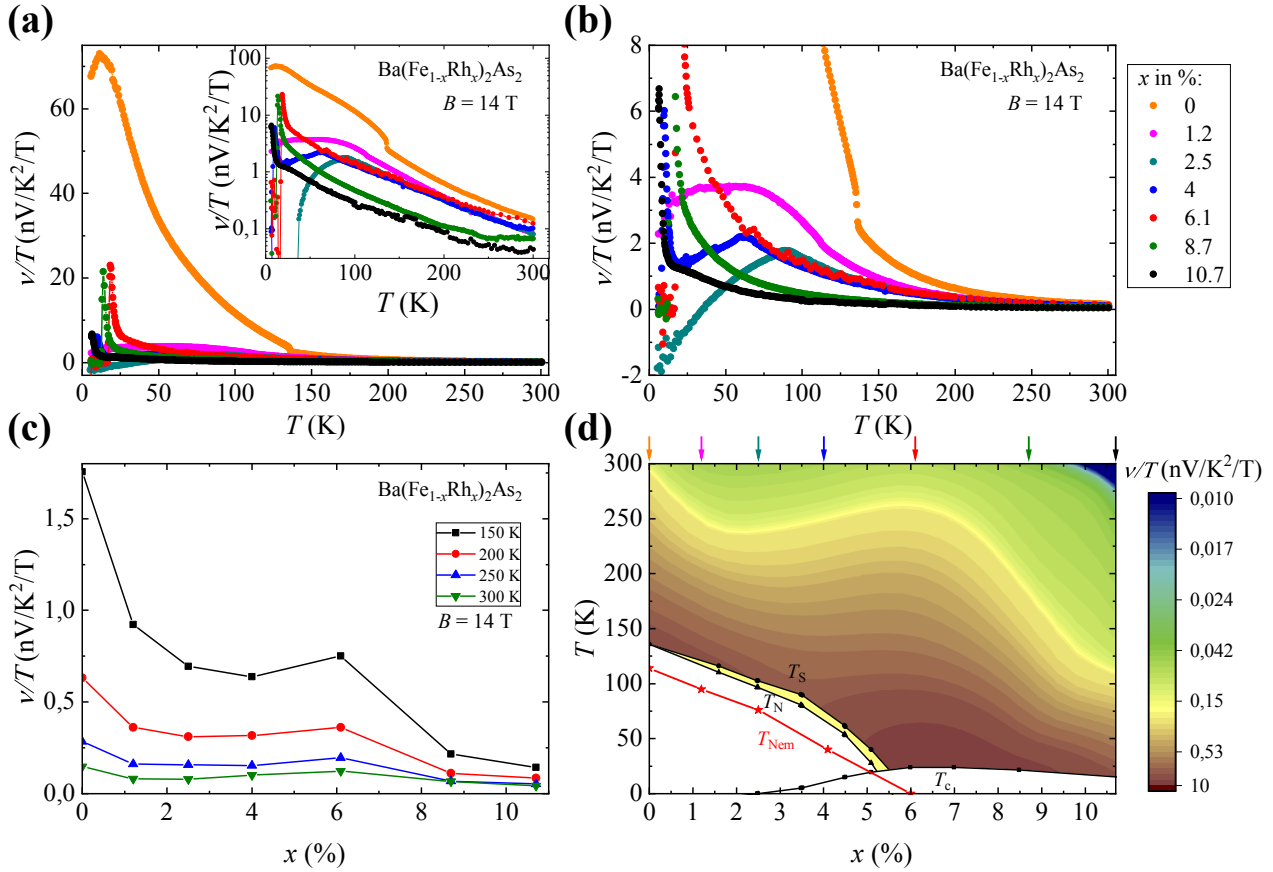
Es stellt sich die Frage, besonders im Hinblick auf die Sensitivität des Nernst-Koeffizienten auf nematische Fluktuationen, ob die Übereinstimmung der Dotierabhängigkeit von  $\nu/T$  und der des Elasto-Widerstands ein universelles Phänomen darstellt. Um dies zu überprüfen, sollen, wie bereits oben erwähnt, im Folgenden Nernst-Effekt-Daten an Rh-dotiertem  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  zum Vergleich mit  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  herangezogen werden. Messungen an diesem System wurden bereits ausführlich in Ref. [73] und [217], insbesondere im Hinblick auf den Einfluss nematischer Fluktuationen, diskutiert.

Abbildung 5.25a zeigt den Nernst-Koeffizienten geteilt durch die Temperatur  $\nu/T$  für alle gemessenen Rh-Konzentrationen von  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  in Abhängigkeit von  $T$ . Im Inset sind die gleichen Daten in einer semi-logarithmischen Darstellung gezeigt.  $\nu/T$  ist für alle Tempe-



**Abbildung 5.24:** Nematischen Suszeptibilität  $d\eta/d\epsilon$  von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  aus Ref. [208].  $T_S$ ,  $T_N$ ,  $T_c$  und  $T_{Nem}$  sind jeweils durch orangene Dreiecke, blaue Diamanten, grüne Kreise und rote Sterne markiert. Die Curie-Konstante  $C$  (lila Quadrate) ist auf der rechten Achse aufgetragen.

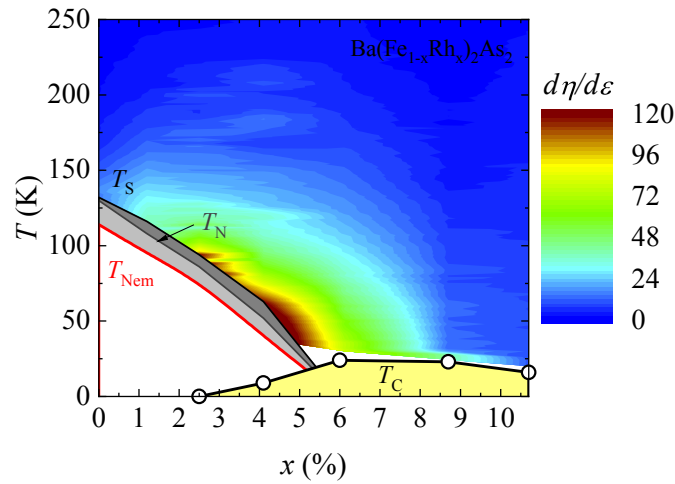
raturen groß und positiv (außer im Tieftemperaturbereich für  $x = 2,5$  %) und ist besonders in der nematischen Phase der un- und unterdotierten Proben ( $x = 0$  %, 1,2 %, 2,5 % und 4 %) verstärkt. Die Messungen zeigen typische Signaturen der Phasenübergänge in der 122-Familie der eisenbasierten Supraleiter, so zeigt sich mit sinkender Temperatur in undotiertem  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  ein steiler Anstieg von  $\nu/T$  um zwei Größenordnungen am strukturellen/magnetischen Übergang bei  $T_S \approx 135$  K (in undotierten Vertretern der 122-Familie liegen  $T_S$  und  $T_N$  bei der gleichen Temperatur, vgl. Abschnitt 5.1). Dieser ungewöhnlich große Nernst-Effekt lässt sich, wie oben im Fall von  $\text{LaFeAsO}$  beschrieben, auf die Bildung von Dirac-Banddispersionen in der orthorhombischen Phase zurückführen [179–182]. In Abbildung 5.25b ist eine Vergrößerung der  $\nu/T$ -Daten dargestellt, um die Unterscheidung der einzelnen Dotierstufen zu ermöglichen. Mit endlicher Dotierung spalten sich die strukturellen und magnetischen Phasenübergänge auf ( $T_S > T_N$ ). In den unterdotierten Proben sind keine klaren Hinweise auf den strukturellen Phasenübergang sichtbar, nur  $x = 1,2$  % zeigt einen kleinen Sprung bei  $T_N \approx 110$  K, gefolgt von einem Maximum in der nematischen Phase. Für  $x = 2,5$  % befindet sich das Maximum zwischen  $T_S \approx 105$  K und  $T_N \approx 85$  K, ebenso für  $x = 4$  % zwischen  $T_S \approx 70$  K und  $T_N \approx 60$  K. Das Verhalten in der nematischen Phase soll jedoch aus oben genannten Gründen, unter anderem der Domänenbildung, hier nicht näher analysiert werden. Ein supraleitender Grundzustand wird für Dotierstufen  $x > 2,5$  % erreicht, wobei sich ein großes Maximum von  $\nu/T$  bei tiefen Temperaturen ausbildet, was auf die beweglichen Flussschläuche in der supraleitenden Phase



**Abbildung 5.25:** Nernst-Koeffizient in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  geteilt durch die Temperatur (Daten aus Ref. [73] und [217]) in Abhängigkeit von  $T$  und  $x$ . Alle Daten wurden innerhalb der  $ab$ -Ebene mithilfe eines Magnetfeldes  $B = 14 \text{ T}$  in  $c$ -Richtung aufgenommen. **(a)**  $\nu/T$  in Abhängigkeit der Temperatur in normaler und semi-logarithmischer Darstellung (Inset). **(b)** Vergrößerung der Daten aus Abbildung (a). **(c)**  $\nu/T$  in Abhängigkeit der Rh-Konzentration  $x$  für ausgewählte Temperaturen. **(d)** Farbkodiertes Phasendiagramm von  $\nu/T$  in Abhängigkeit von  $T$  und  $x$ . Die entsprechend gefärbten Pfeile am oberen Rand markieren die gemessenen Dotierstufen.  $T_S$ ,  $T_N$  und  $T_C$  stammen aus Ref. [221].  $T_{Nem}$  wurde durch Elasto-Widerstands-Messungen bestimmt (vgl. Abbildung 5.26), welche von Federico Caglieris am IFW Dresden durchgeführt wurden.

zurückgeführt werden kann (vgl. Kapitel 2.1.4).

In  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  geht beim Abkühlen ein stetiger Anstieg von  $\nu/T$  dem Phasenübergang bei  $T_S$  voraus. Der große Absolutwert bei Raumtemperatur und der stetige Anstieg ändern sich jedoch kaum für endliche Dotierungen. Dieses Verhalten bleibt auch in den Proben bestehen, welche keine nematische Phase entwickeln und ist somit im gesamten untersuchten Bereich des Phasendiagramms präsent. Interessanterweise ähneln die gemessenen Kurven sehr denen in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ , die Temperaturverläufe des Nernst-Koeffizienten scheinen also universell in verschiedenen Vertretern der eisenbasierten Supraleiter aufzutreten, zumal nur für eine Dotierung von  $x = 2,5 \%$  ein Vorzeichenwechsel bei tiefen Temperaturen auftritt. Besonders in der tetragonalen Phase scheint der gleiche Mechanismus den großen Nernst-Koeffizienten und seinen stetigen Anstieg hin zu tiefen Temperaturen hervorzurufen. Vergleicht man die Abso-



**Abbildung 5.26:** Farbkodierte Darstellung der nematischen Suszeptibilität  $d\eta/d\epsilon$  von  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  in Abhängigkeit von  $T$  und  $x$ .  $T_{Nem}$  entspricht der Temperatur, an dem  $d\eta/d\epsilon$  divergiert und wurde aus Curie-Weiss-Anpassungen extrahiert (vgl. Abschnitt 5.2.1).

lutwerte von  $\nu/T$  im gesamten Dotierbereich, so ist ebenfalls ein nicht-monotones Verhalten sichtbar. Abbildung 5.25c zeigt  $\nu/T$  für ausgewählte Temperaturen in Abhängigkeit der Rh-Konzentration  $x$ . Auch hier ist ein nicht-monotoner Verlauf sichtbar. Nach einem starken Abfall von der undotierten Probe hin zu endlicher Dotierung bildet sich ein Plateau, welches anschließend ein Maximum bei optimaler Dotierung aufweist. In Abbildung 5.25d ist ein farbkodiertes Phasendiagramm von  $\nu/T$  in Abhängigkeit der Temperatur und Dotierung dargestellt. Gut sichtbar ist ein breiter Bereich, in dem  $\nu/T$  erhöht ist und welcher dem supraleitenden Dom folgt sowie ein Maximum bei optimaler Dotierung aufweist. Dieses Verhalten wurde bereits in Ref. [73] und [217] auf den Einfluss nematischer Fluktuationen zurückgeführt, was eindeutig durch die theoretischen Betrachtungen in Abschnitt 5.3.3 gestützt wird.

Nun ist es sinnvoll, für  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  ebenfalls den Vergleich zu Elasto-Widerstandsmessungen heranzuziehen. Die Methode der Elasto-Widerstandsmessungen wurde zuerst an Co-dotierten  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  angewendet und suggerierte eine Erhöhung der nematischen Suszeptibilität bei optimaler Dotierung [184, 191]. Da die Substitutionen mit Co und Rh die gleiche Elektronendotierung hervorrufen [221–223], liegt ein Vergleich der Dotierabhängigkeit des Nernst-Koeffizienten in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  mit dem Elasto-Widerstand in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  nahe. In Ref. [191] wurde ebenfalls ein eindeutiges nicht-monotones Verhalten des Elasto-Widerstands in Abhängigkeit der Dotierung nachgewiesen (vgl. Abbildung 5.9b), jedoch befindet sich das Maximum eher knapp im unterdotierten Bereich und folgt nicht dem supraleitenden Dom. Um dieses Verhalten zu überprüfen, wurden Elasto-Widerstandsmessungen an  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  von Federico Caglieris am IFW Dresden durchgeführt. Ein entsprechendes farbkodiertes Phasendiagramm zeigt die nematische Suszeptibilität als Funktion von Temperatur und Dotierung in Abbildung 5.26. In  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  befindet sich das Maximum ebenfalls in der unterdo-

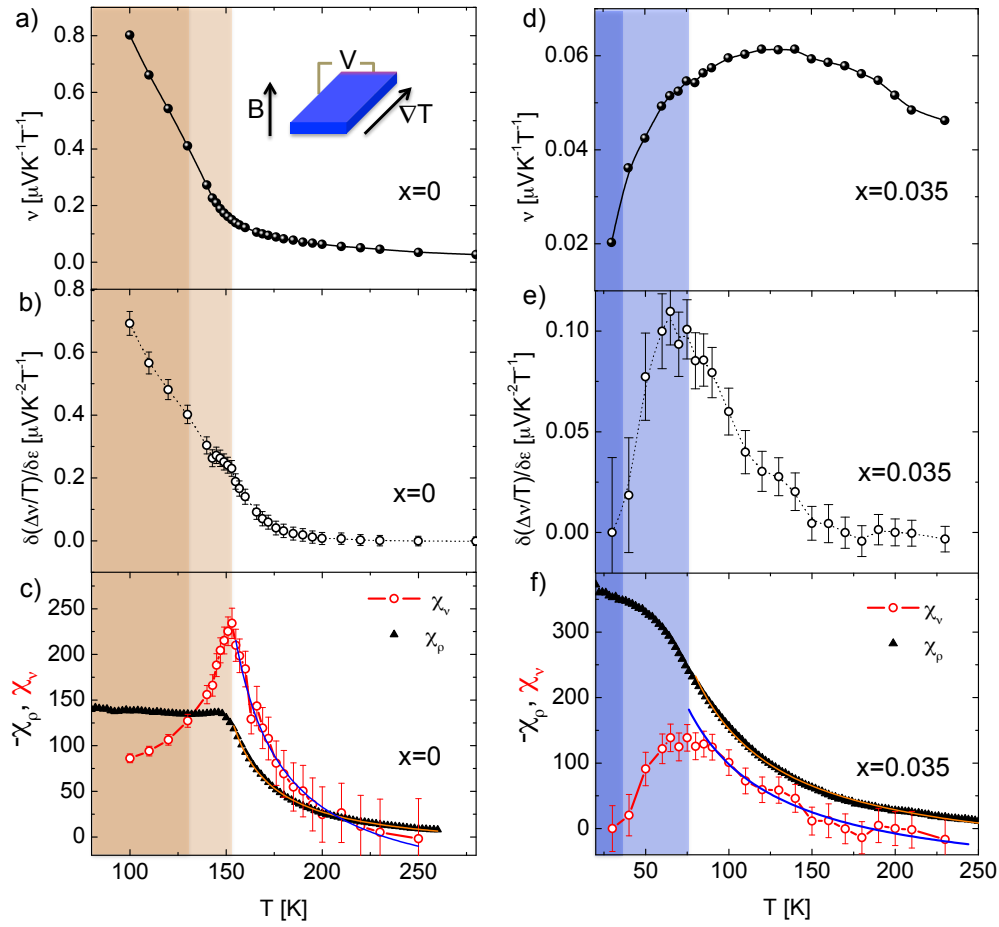


tierten Region des Phasendiagramms, was den Unterschied zwischen der Dotierabhängigkeit des Nernst-Koeffizienten und des Elasto-Widerstands bestätigt.

Ausgehend von den theoretischen Betrachtungen zur Verstärkung des Nernst-Effekts aufgrund nematischer Fluktuationen, stellt sich die Frage nach der Ursache dieser unterschiedlichen Dotierabhängigkeit des Elasto-Widerstands und des Nernst-Koeffizienten. Eine mögliche Erklärung wäre die zusätzliche Verstärkung  $\nu$  bzw.  $N$  durch supraleitende Fluktuationen, welche oft als Erklärung für ungewöhnlich große Nernst-Signale herangezogen wurden [45, 53] (vgl. Kapitel 2.1.4). Aufgrund der deutlichen Erhöhung selbst bei hohen Temperaturen, welche weit über der charakteristischen Energieskala supraleitender Fluktuationen liegen, kann dieses Szenario jedoch ausgeschlossen werden. Eine weitere Erklärung wäre, dass der Elasto-Widerstand lediglich sensitiv auf nematische Fluktuationen reagiert, wenn diese an das Kristallgitter koppeln. Diese Kopplung ist am stärksten in der Nähe des strukturellen Phasenübergangs, der von einer weichen Phononenmode begleitet wird, und nimmt mit steigender Dotierung ab. Da der Nernst-Effekt nicht auf eine solche Kopplung an das Gitter angewiesen ist, kann er auch in Bereichen, welche keinen strukturellen Phasenübergang zeigen, sensitiv auf nematische Fluktuationen sein.

Einen Hinweis zur Erklärung des Unterschiedes liefern neuartige Messungen des Elasto-Nernst- und Elasto-Seebeck-Effekts an  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  mit  $x = 0$  und  $x = 3,5\%$ , welche von Federico Caglieris am IFW Dresden durchgeführt wurden [224]. Hierbei werden, analog zur Bestimmung des Elasto-Widerstands, die Abhängigkeiten der Anisotropien der thermoelektrischen Transportkoeffizienten von einer externen Dehnung  $\epsilon$  bestimmt. Beide Größen  $\delta(\Delta\nu/T)/\delta\epsilon$  und  $\delta(\Delta S/T)/\delta\epsilon$  (wobei  $\Delta\nu = \nu(\epsilon) - \nu(\epsilon = 0)$  und  $\Delta S = S(\epsilon) - S(\epsilon = 0)$ ) zeigen bereits bei Raumtemperatur endliche Werte und entwickeln ein divergentes Verhalten beim Abkühlen bis hin zu  $T_S$ . Die Abbildungen 5.27b und 5.27e zeigen  $\delta(\Delta\nu/T)/\delta\epsilon$  für  $x = 0$  und  $x = 3,5\%$  in Abhängigkeit der Temperatur. Aus  $\delta(\Delta\nu/T)/\delta\epsilon$  und  $\delta(\Delta S/T)/\delta\epsilon$  lassen sich die Suszeptibilitäten  $\chi_\nu = \delta(\Delta\nu/\nu)/\delta\epsilon$  und  $\chi_S = \delta(\Delta S/S)/\delta\epsilon$  ableiten, welche sich jedoch vor allem für  $T < T_S$  von  $\chi_\rho$ , der nematischen Suszeptibilität aus Elasto-Widerstandsmessungen, unterscheiden (vgl. Abbildungen 5.27c und 5.27f). Dies kann durch die verschiedenen Zusammensetzungen der Transportkoeffizienten erklärt werden. Da gilt  $S = \alpha_{xx}\rho_{xx}$ , ergibt sich  $\chi_S = \chi_\alpha + \chi_\rho$ , wobei  $\chi_\alpha = \delta(\Delta\alpha_{xx}/\alpha_{xx})/\delta\epsilon$  die zum Diagonal-Element des Peltier-Tensors zugehörige Suszeptibilität ist. Ähnliches zeigt sich für den Elasto-Nernst-Koeffizienten, für den gilt:  $\delta(\nu)/\delta\epsilon = \alpha_{xy}\delta\rho_{xx}/\delta\epsilon - \rho_{xx}\delta\alpha_{xx}/\delta\epsilon$  [224]. Für eine komplette Beschreibung des Einflusses von nematischen Fluktuationen auf die Elasto-Transportkoeffizienten sind also die beiden nematischen Suszeptibilitäten  $\chi_\alpha$  und  $\chi_\rho$  notwendig. Das liegt daran, dass sich die Symmetriebrechung, welche mit der nematischen Ordnung bzw. nematischer Fluktuationen einhergeht, über zwei verschiedene Größen auf die Transportkoeffizienten auswirken kann. Zum einen kann eine anisotrope Streuzeit auftreten und zum anderen kann es zu Anisotropien auf der Fermi-Fläche kommen, welche jeweils eher mit dem Spin- bzw. dem orbitalen Freiheitsgrad verbunden sind.





**Abbildung 5.27:** Messungen des Elasto-Nernst-Effekts in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  aus Ref. [224]. **a)** und **d)** Nernst-Koeffizient in Abhängigkeit der Temperatur für  $x = 0$  bzw.  $x = 3,5 \%$  (vgl. Abbildungen 5.16a und 5.18a). **b)** und **e)**  $\delta(\Delta\nu/T)/\delta\epsilon$  in Abhängigkeit der Temperatur für  $x = 0$  bzw.  $x = 3,5 \%$ . **c)** und **f)** Vergleich der nematischen Suszeptibilitäten  $\chi_\nu = \delta(\Delta\nu/\nu)/\delta\epsilon$  und  $\chi_\rho$  für  $x = 0$  bzw.  $x = 3,5 \%$ .

Anisotropien auf der Fermi-Fläche sollten eher zu großen Anisotropien in  $\alpha$  führen [52], während anisotrope Streuzeiten eher die Anisotropie von  $\rho$  verstärken. Welche mikroskopischen Prozesse dominieren, kann erst durch den Vergleich von  $\chi_\alpha$  und  $\chi_\rho$  geklärt werden.

Da somit die Auswirkungen nematischer Fluktuationen nicht durch den Elasto-Widerstand allein sondiert werden können, ist eine Abweichung der Dotierabhängigkeiten von  $\chi_\rho$  und  $\nu/T$  nicht verwunderlich. Auch wird dabei klar, dass ein Zweiband-Modell, welches lediglich den Einfluss anisotroper Besetzungen der Zustände berücksichtigt (und wie es in dieser Arbeit zur Unterstützung herangezogen wurde), nicht für eine komplette Beschreibung der Problematik nematischer Fluktuationen ausreicht. Vielmehr versprechen sogenannte Orbital-selektive Spin-nematische Modelle, bei welchen der orbitale Charakter von Spin-Fluktuationen berücksichtigt wird, in Zukunft vollständige Beschreibungen der Transporteigenschaften zu liefern, da sie sowohl anisotrope Streuraten als auch Anisotropien auf der Fermi-Fläche berücksichtigen [225–227].

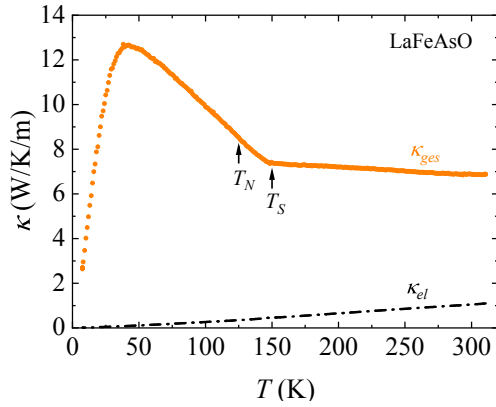
#### 5.3.4 Wärmeleitung in $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$

Die Wärmeleitfähigkeit wurde in allen Proben innerhalb der  $ab$ -Ebene gemessen. Da die Richtung innerhalb der Ebene willkürlich gewählt ist, wird  $\kappa_{ii}$  im Folgenden als  $\kappa$  bezeichnet.

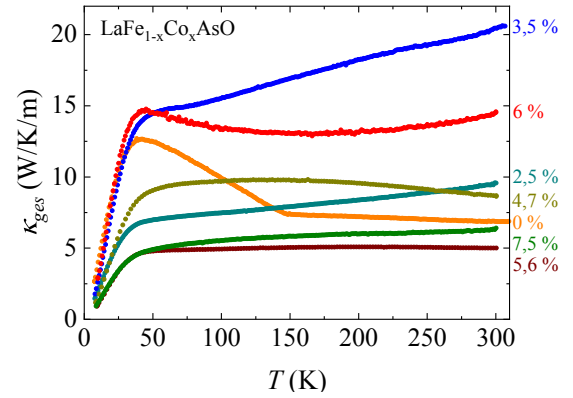
In Abbildung 5.28a sind die gemessene Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{ges}$  von LaFeAsO sowie der aus dem spezifischen Widerstand mithilfe des Wiedemann-Franz-Gesetzes (vgl. Kapitel 2.1.3) bestimmte elektronische Anteil der Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{el}$  in Abhängigkeit der Temperatur dargestellt. Aufgrund des relativ hohen Widerstandes, was einer geringen elektronischen Leitfähigkeit entspricht, ist der elektronische Anteil der Wärmeleitfähigkeit nahezu vernachlässigbar, was sehr gut mit der Literatur übereinstimmt [198, 209, 228]. Der elektronische Anteil der Wärmeleitfähigkeit erreicht einen Maximalwert von  $\kappa_{el} \approx 1 \text{ W/K/m}$  bei Raumtemperatur und fällt stetig mit sinkender Temperatur ab. Dagegen zeigt sich ein Wert von  $\kappa_{ges} \approx 7 \text{ W/K/m}$  bei Raumtemperatur, welcher beim Abkühlen nahezu linear ansteigt. Dies steht im Gegensatz zu einem  $1/T$ -Verhalten, welches man für die phononische Wärmeleitfähigkeit bei hohen Temperaturen erwarten würde (vgl. Abschnitt 2.1.3), eine Erklärung liefern jedoch weiche Phononen, welche in der Nähe des strukturellen Phasenübergangs auftreten und zu verstärkter Streuung und somit zur Reduktion von  $\kappa_{ges}$  führen können.

Am Phasenübergang bei  $T_S \approx 148 \text{ K}$  zeigt sich ein Knick und  $\kappa_{ges}$  steigt in der orthorhombischen Phase mit weiterem Abkühlen wesentlich stärker an, bis ein Maximum bei  $T \approx 40 \text{ K}$  und ungefähr  $20,5 \text{ W/K/m}$  erreicht wird. Anschließend fällt die Wärmeleitfähigkeit stark zu tiefen Temperaturen hin ab. Dieser Temperaturverlauf wurde bereits in LaFeAsO- und SmFeAsO-Polykristallen nachgewiesen [209, 228]. Der starke Anstieg unterhalb von  $T_S$  lässt sich dabei mit dem Verschwinden der weichen Phononen erklären, wodurch die Streuung abnimmt. Eine zusätzliche Erhöhung der Wärmeleitfähigkeit wird theoretisch auch am magnetischen Phasenübergang vorausgesagt [228], da mit dem Einsetzen der SDW-Phase (für manche elektronischen Zustände) eine Energielücke entsteht und sich aus diesem Grund die Phonon-Elektron-Streuung verringert. Eine deutliche Änderung des Anstieges bei  $T_N$  ist in den hier vorliegenden Daten jedoch nicht erkennbar.

Abbildung 5.28b zeigt die gemessenen Wärmeleitfähigkeiten aller Co-Dotierstufen in Abhängigkeit der Temperatur. Für  $x = 2,5 \%$  ergibt sich bei Raumtemperatur eine Wärmeleitfähigkeit von rund  $9,5 \text{ W/K/m}$ , welche mit sinkender Temperatur monoton und nahezu linear abfällt, bis bei  $T \approx 45 \text{ K}$  ein starker Abfall hin zu tiefen Temperaturen einsetzt. An den Phasenübergängen zeigen sich keine Änderungen des Verlaufs und auch das typische Maximum bei tiefen Temperaturen ist abwesend. Letzteres wäre aufgrund der durch die Dotierung erhöhten Defektdichte nichts besonderes, da dadurch die Streuung der Phononen extrem verstärkt werden kann [229]. Die bei Raumtemperatur und in einem Großteil des Temperaturbereichs gemessenen größeren Werte von  $\kappa_{ges}$  im Vergleich zu  $x = 0$  passen jedoch nicht in dieses Bild, da eine erhöhte Streuung an Defekten im gesamten Temperaturbereich spürbar sein müsste. Diese Erhöhung ließe sich andererseits durch den systematischen Fehler aufgrund einer nicht perfek-



(a) Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{ges}$  (orangene Punkte) sowie elektronische Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{el}$  (schwarze Striche) von  $\text{LaFeAsO}$  in Abhängigkeit von  $T$ .  $\kappa_{el}$  wurde mithilfe des Wiedemann-Franz-Gesetzes aus dem spezifischen Widerstand bestimmt.

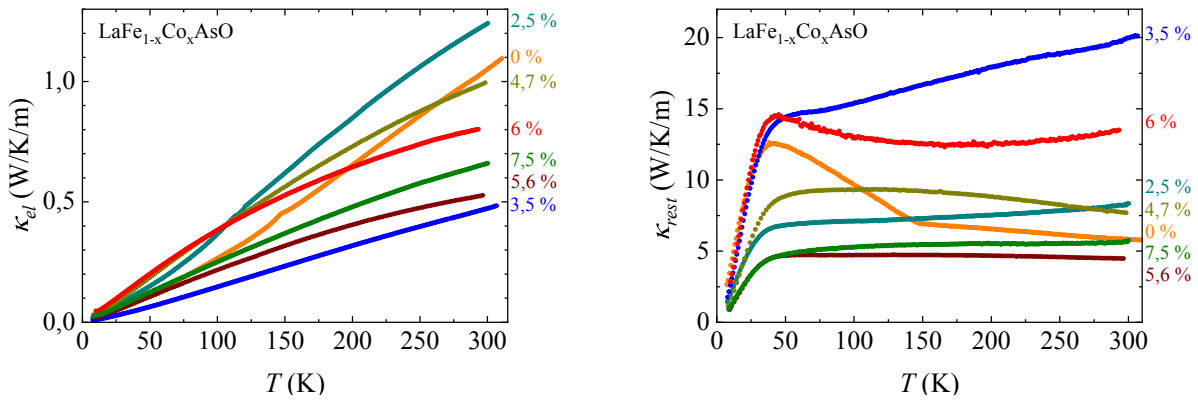


(b) Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{ges}$  für verschiedene Co-Dotierstufen  $x$  in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  in Abhängigkeit der Temperatur.

**Abbildung 5.28:** Ergebnisse der Wärmeleitfähigkeitsmessungen an  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ .

ten Probengeometrie erklären. Betrachtet man jedoch die Wärmeleitfähigkeit für  $x = 3,5 \%$ , so ist dieses Argument nicht mehr haltbar. Bei Raumtemperatur zeigt sich hier ein Wert von  $\kappa_{ges} \approx 20 \text{ W/K/m}$ , beinahe dreimal so hoch wie in der undotierten Probe. Mit sinkender Temperatur nimmt die Wärmeleitfähigkeit auch hier monoton und, bis auf zwei Wendepunkte bei hohen Temperaturen, beinahe linear ab, bis bei  $T \approx 65 \text{ K}$  und  $\kappa_{ges} \approx 15 \text{ W/K/m}$  ein weiterer Wendepunkt erreicht wird, nach welchem ein starker Abfall einsetzt.

Für  $x = 4,7 \%$  zeigt sich hingegen ein anderes Verhalten. Vom Raumtemperaturwert bei  $\kappa_{ges} \approx 9 \text{ W/K/m}$  nimmt die Wärmeleitfähigkeit mit sinkender Temperatur zu und es bildet sich ein sehr breites Maximum bei  $T \approx 125 \text{ K}$ , worauf  $\kappa_{ges}$  bei weiterem Abkühlen nur schwach abnimmt, bevor schließlich ab  $T \approx 50 \text{ K}$  der starke Abfall hin zu tiefen Temperaturen einsetzt. Mit weiterer Co-Dotierung ergibt sich für  $x = 5,6 \%$  eine Wärmeleitfähigkeit bei Raumtemperatur von rund  $5 \text{ W/K/m}$ , welche im gesamten Temperaturbereich nahezu konstant bleibt und erst unterhalb von  $T \approx 50 \text{ K}$  abfällt. Mit weiter steigender Dotierung im optimalen Dotierbereich  $x = 6 \%$  fällt  $\kappa_{ges}$  jedoch nicht noch weiter ab, sondern entwickelt im Gegenteil Werte bei Raumtemperatur von rund  $14,5 \text{ W/K/m}$ , was einer Verdopplung im Vergleich zur undotierten Probe entspricht. Beim Abkühlen folgt zunächst ein leichter Abfall der Wärmeleitfähigkeit hin zu einem sehr breiten Minimum bei  $T \approx 160 \text{ K}$  und  $\kappa_{ges} \approx 13 \text{ W/K/m}$ , gefolgt von einem Maximum bei  $T \approx 45 \text{ K}$ , bei welchem wieder Werte von  $\kappa_{ges} \approx 14,5 \text{ W/K/m}$  (entspricht der Raumtemperatur-Wärmeleitfähigkeit) erreicht werden. Mit weiterem Abkühlen kommt es zum gewohnten steilen Abfall von  $\kappa_{ges}$ . Für  $x = 7,5 \%$  zeigen sich wieder geringe Absolutwerte von  $\kappa_{ges} \approx 6,5 \text{ W/K/m}$  bei Raumtemperatur. Mit sinkender Temperatur nimmt  $\kappa_{ges}$  monoton



(a) Mittels des Wiedemann-Franz-Gesetzes aus den Daten der spezifischen Widerstände bestimmte elektronische Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{el}$  für verschiedene Co-Dotierstufen  $x$  von LaFe<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>AsO in Abhängigkeit der Temperatur.

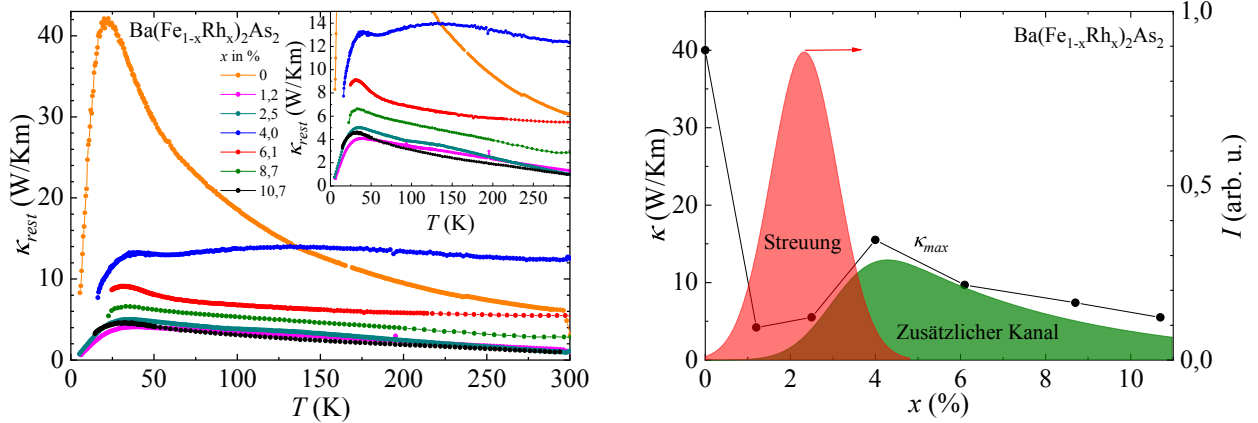
(b) Differenz aus gemessener Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{ges}$  und  $\kappa_{el}$  von LaFe<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>AsO in Abhängigkeit von  $T$ .

**Abbildung 5.29:** Verschiedene Beiträge zur Wärmeleitfähigkeit in LaFe<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>AsO.

leicht ab bis ungefähr 5 W/K/m bei  $T \approx 60$  K, anschließend beschleunigt der Abfall mit weiter sinkender Temperatur stark.

In Abbildung 5.29a sind die mithilfe des Wiedemann-Franz-Gesetzes (vgl. Kapitel 2.1.3) aus den spezifischen Widerständen (vgl. Abschnitt 5.3.1) errechneten elektronischen Beiträge zur Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{el}$  für alle gemessenen Co-Dotierstufen von LaFe<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>AsO dargestellt. Mit einem Absolutwert von maximal  $\kappa_{el} \approx 1,25$  W/K/m für  $x = 2,5$  % bei Raumtemperatur ist ihr Anteil an  $\kappa_{ges}$  nicht ausschlaggebend. Abbildung 5.29b zeigt die Rest-Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{rest} = \kappa_{ges} - \kappa_{el}$  in Abhängigkeit der Temperatur. Das Berücksichtigen des elektronischen Beitrages ändert, bis auf eine Abschwächung der Anstiege bei hohen Temperaturen, nichts am Gesamtbild der Wärmeleitfähigkeit in LaFe<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>AsO und liefert insbesondere keine Erklärung für die verschiedenen Temperaturverläufe und die nicht-monotone Abhängigkeit der Absolutwerte von der Dotierung. Die Restbeiträge ähneln dabei nicht den typischen Verläufen einer phononischen Wärmeleitfähigkeit (vgl. Kapitel 2.1.3) und können auch für hohe Temperaturen nicht durch ein  $1/T$ -Verhalten angepasst werden. Lediglich die Verläufe für  $x = 5,6$  % und  $x = 7,5$  % ähneln z.B. der Wärmeleitfähigkeit von F-dotiertem LaFeAsO, welche in Ref. [228] erfolgreich durch ein theoretisches Modell von Wärmeleitung durch Phononen mit erhöhter Defektstreuung angepasst wird. Die nicht-monoton von der Dotierung abhängenden Absolutwerte und die eigenartigen Temperaturverläufe könnten dadurch jedoch nicht erklärt werden.

Ähnliche Temperaturverläufe sowie ein nicht-monotones Verhalten der Absolutwerte mit der Dotierung zeigen sich in Rh-dotiertem BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> [73, 217]. Die Rest-Wärmeleitfähigkeiten von Ba(Fe<sub>1-x</sub>Rh<sub>x</sub>)<sub>2</sub>As<sub>2</sub> aus Ref. [217] sind in Abbildung 5.30a in Abhängigkeit der Tempera-



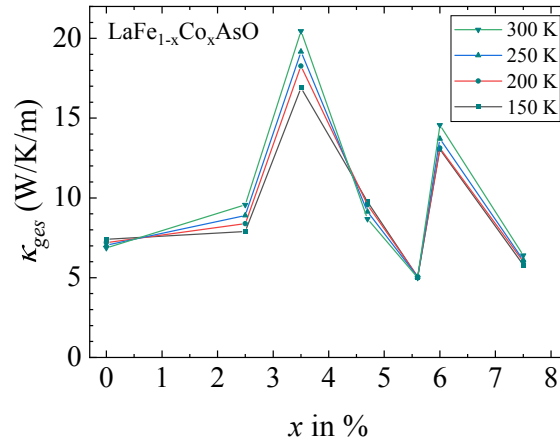
(a) Wärmeleitfähigkeit in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  (nach Abzug des elektronischen Beitrags) für verschiedene Rh-Konzentrationen in Abhängigkeit der Temperatur aus Ref. [217]. Im Inset ist eine Vergrößerung der Daten gezeigt.

(b) Gemessene Maximalwerte der Wärmeleitfähigkeit in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  in Abhängigkeit der Rh-Konzentration  $x$  aus Ref. [217]. Der rot gefärbte Bereich repräsentiert das Szenario eines zusätzlichen Streukanals (rechte Achse) mit starker Dotierabhängigkeit. Der grün gefärbte Bereich stellt einen hypothetischen Zusatzbeitrag zur Wärmeleitfähigkeit dar, welcher ebenfalls stark von der Dotierung abhängt.

**Abbildung 5.30:** Wärmeleitfähigkeitsmessungen an  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  aus Ref. [217].

tur dargestellt. In diesem Fall weist die undotierte  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ -Probe die mit Abstand größte Wärmeleitfähigkeit auf, dies kann jedoch durch einen sehr reinen Einkristall erklärt werden. Mit steigender Dotierung sinkt die Wärmeleitfähigkeit aufgrund steigender Phonon-Defekt-Streuung. Jedoch steigen, nach anfänglichem Abfall der Wärmeleitfähigkeit mit endlicher Dotierung, die Absolutwerte im hohen unterdotierten Bereich wieder an und es bildet sich ein Maximum. Abbildung 5.30b zeigt die Maximalwerte von  $\kappa$  in Abhängigkeit der Dotierung  $x$  aus Ref. [217], wobei das nicht-monotone Verhalten erneut sichtbar wird.

Zur Erklärung wurden zwei Szenarien diskutiert. Zum einen könnte ein zusätzlicher Streumechanismus existieren, welcher stark von der Dotierung abhängt (vgl. rote Fläche in Abbildung 5.30b). In diesem Dotierbereich findet man jedoch darüber hinaus keinerlei auffälliges Verhalten anderer Messgrößen. Andererseits könnte ein zusätzlicher Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit existieren, welcher ebenfalls stark von der Dotierung abhängt und im unterdotierten bzw. optimal dotierten Bereich am stärksten ist. Spin-Fluktuationen, welche im gesamten untersuchten Bereich des Phasendiagramms vorkommen [230], können aufgrund ihrer Dekohärenz als Quelle eines Zusatzbeitrages ausgeschlossen werden [217]. Aufgrund des ähnlichen nicht-monotonen Dotierverhaltens des Nernst-Effekts (siehe Abbildung 5.25) fällt der Verdacht eines zusätzlichen Kanals der Wärmeleitung auf die nematischen Fluktuationen selbst, jedoch ist der genaue Mechanismus eines solchen Szenarios unklar.



**Abbildung 5.31:** Gemessene Wärmeleitfähigkeit  $\kappa_{ges}$  von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  in Abhängigkeit der Dotierung  $x$  für verschiedene ausgewählte Temperaturen.

Eine ähnliche Analyse kann für die Wärmeleitfähigkeit in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  durchgeführt werden. Abbildung 5.31 zeigt  $\kappa_{ges}$  für ausgewählte Temperaturen in Abhängigkeit der Co-Dotierung  $x$ . Deutlich ist eine nicht-monotone Abhängigkeit von der Dotierung erkennbar, welche zwei Maxima aufweist. Das erste bei  $x = 3,5$  % und das zweite bei  $x = 6$  % (optimale Dotierung). Dabei ist das Maximum bei  $x = 3,5$  % wesentlich größer als jenes bei optimaler Dotierung. Der Verlauf gleicht sehr der Dotierabhängigkeit der nematischen Suszeptibilität aus Elasto-Widerstandsmessungen aus Ref. [208] (vgl. Abbildung 5.24). Dieser Zusammenhang besteht auch in Rh-dotiertem  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ , in welchem die nematische Suszeptibilität  $\chi_\rho$  im unterdotierten Bereich, nahe des supraleitenden Doms, maximal wird (vgl. Abbildung 5.26). In diesem Bereich befindet sich ebenfalls das lokale Maximum der Wärmeleitfähigkeit (siehe Abbildung 5.30b).

Die Dotierabhängigkeit der Absolutwerte der Wärmeleitfähigkeit müssen jedoch mit Vorsicht betrachtet werden, zumal es bei der Kontaktierung kleiner Proben zu großen geometrischen Fehlereinflüssen kommen kann, da die minimale Ausdehnung der Klebestellen des Thermoelements beinahe in der Größenordnung der Probenausdehnung liegt (vgl. Kapitel 3). Somit können relative Fehler des Absolutwertes im Bereich von bis zu 80 % entstehen. Da diese Fehler jedoch rein geometrisch sind und somit kaum von der Temperatur abhängen, lassen sich trotzdem die temperaturabhängigen Verläufe der Wärmeleitfähigkeit vergleichen. Dabei stechen besonders die Verläufe der Dotierstufen heraus, welche das lokale Maximum der Absolutwerte aufweisen ( $x = 4$  % in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$ , vgl. Abbildung 5.30a, und  $x = 3,5$  % in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ , vgl. Abbildung 5.29b). Beide Wärmeleitfähigkeiten sind, im Vergleich zu ihren Tieftemperatur-Werten, besonders im Bereich hoher Temperaturen stark erhöht und zeigen einen beständigen Anstieg mit steigender Temperatur ( $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ ) bzw. ein breites Hochtemperaturmaximum ( $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$ ). Auch die optimal dotierten Proben ( $x = 6,1$  % in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  und  $x = 6$  % in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ ) zeigen übereinstimmend einen nur we-

nig variierenden Verlauf und deuten ein Maximum von  $\kappa_{rest}$  bei Temperaturen oberhalb der Raumtemperatur an.

Somit besteht ein universelles Verhalten der Wärmeleitfähigkeit in diesen beiden Vertretern der 122- und 1111-Familie eisenbasierter Supraleiter und es kann auch für  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  aufgrund des ähnlichen nicht-monotonen Dotierverhaltens von Elasto-Widerstand, Nernst-Effekt und Wärmeleitfähigkeit von einem signifikanten Einfluss der nematischen Fluktuationen auf die Wärmeleitfähigkeit ausgegangen werden, dessen Evaluierung jedoch den Zugang zu vollständigen mikroskopischen Modellen des Wärmetransports in eisenbasierten Supraleitern benötigt.

## 5.4 Diskussion

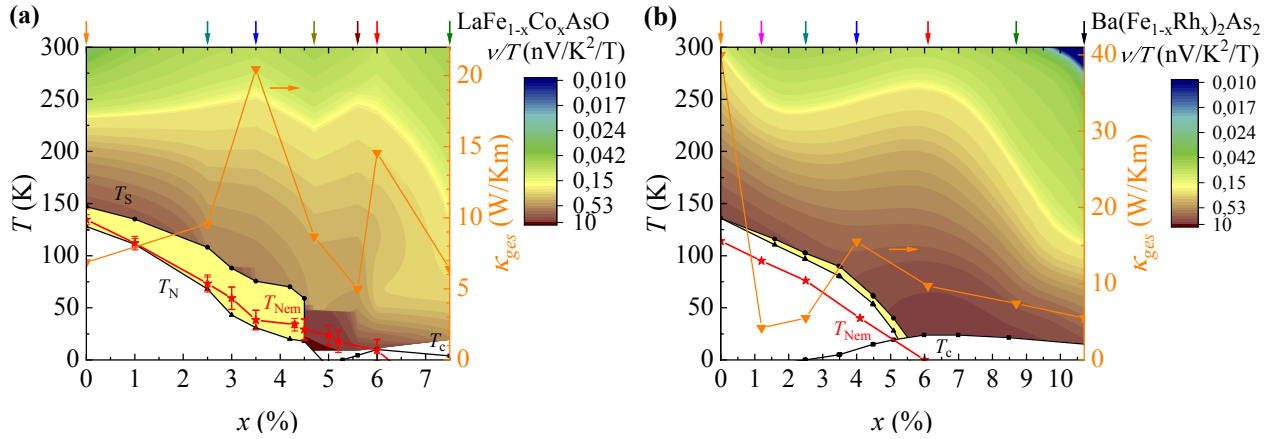
In Abschnitt 5.3.3 wurde mithilfe eines simplen Zweiband-Modells eisenbasierter Supraleiter gezeigt, dass der Nernst-Koeffizient in der Anwesenheit nematischer Fluktuationen stark erhöht wird (vgl. Abbildung 5.20). Erstaunlicherweise kommt es für  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  und  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  in Abhängigkeit der Dotierung  $x$  zu einem Maximum von  $\nu/T$ , welches im Phasendiagramm dem supraleitenden Dom folgt (vgl. Abbildungen 5.25d und 5.23d). Diese Korrelation zwischen  $\nu/T$  und  $T_c$  in verschiedenen Familien eisenbasierter Supraleiter in Verbindung mit den hier vorgestellten Modellrechnungen zeugt eindeutig davon, dass der Nernst-Effekt eine extrem sensitive Sonde für nematische Fluktuationen darstellt, und liefert außerdem starke Hinweise auf Supraleitung, die durch nematische Fluktuationen verstärkt wird.

Dabei liegt das Maximum von  $\nu/T$  sowohl in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  als auch in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  direkt über dem supraleitenden Dom. In  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  zeigt sich zwar ein zweites Maximum, jedoch wird dies nur durch Daten einer Probe gestützt. Dahingegen zeigt die nematische Suszeptibilität aus Elasto-Widerstands-Messungen  $\chi_\rho$  in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  eine klare Erhöhung im unterdotierten Bereich nahe des supraleitenden Doms, jedoch nicht direkt darüber (vgl. Abbildung 5.26). In  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  bildet sich zwar über dem supraleitenden Dom ein Maximum von  $\chi_\rho$ , jedoch befindet sich ein noch größeres Maximum ebenfalls im unterdotierten Bereich (vgl. Abbildung 5.24) [208]. Diese Unterschiede der Dotierabhängigkeiten des Nernst-Effekts und des Elasto-Widerstands lassen sich mithilfe von Messungen des Elasto-Seebeck- und des Elasto-Nernst-Effekts verstehen. Diese zeigen, dass es zum vollständigen Verständnis des Einflusses nematischer Fluktuationen auf die Transportkoeffizienten auch der Berücksichtigung des Elasto-Peltier-Effekts bedarf (vgl. Abschnitt 5.3.3).

Offen bleibt jedoch, wie die außergewöhnlichen Dotierabhängigkeiten der Wärmeleitfähigkeit in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  und  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$ , welche noch einmal zusammen mit Daten des Nernst-Koeffizienten in den Abbildung 5.32 dargestellt sind, zu dieser Erklärung passen, da die oben diskutierten Einflüsse nematischer Fluktuationen in erster Linie elektronische Eigenschaften betreffen. Der elektronische Wärmetransport spielt jedoch eine untergeordnete Rolle (siehe Abschnitt 5.3.4), weshalb die Frage erhalten bleibt, ob das eigenartige Verhalten auf einen zusätzlichen dotierabhängigen Streumechanismus oder einen zusätzlichen Kanal der Wärmeleitung zurückgeht. Messungen der thermischen Ausdehnung an einer Teilauswahl der hier untersuchten  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ -Einkristalle kamen zu dem Ergebnis, dass die an das Gitter koppelnden nematischen Fluktuationen mit steigender Dotierung im unterdotierten Bereich kontinuierlich abgeschwächt werden und ihre Dotierabhängigkeit dem Verlauf von  $T_S$  folgt [163]. Von einer erhöhten Streuung an Gitterfluktuationen in diesem Bereich kann somit nicht ausgegangen werden.

Messungen der Kernspinresonanz sowie der Kernquadrupolresonanz an  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  haben gezeigt, dass es bei F-Substitution zur Bildung von höher-dotierten Clustern kommt, deren





**Abbildung 5.32:** Farbkodierte Phasendiagramme von  $\nu/T$  in Abhängigkeit von  $T$  (linke Achse) und  $x$  (vgl. Abbildungen 5.23d und 5.25d) sowie  $\kappa_{ges}$  (rechte Achse, orangene Dreiecke) in Abhängigkeit von  $x$  in (a)  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  und (b)  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  (Daten aus Ref. [73] und [217]).

Größe im Bereich mehrerer nm liegt (was der supraleitenden Korrelationslänge entspricht [157]) und in welchen eine supraleitende Phase entstehen kann [155] (vgl. Abschnitt 5.1). Somit entsteht im Bereich zwischen  $x \approx 3$  und  $x \approx 4$  % eine kritische mikroskopische Struktur, in der die Cluster gerade groß genug sind, um sich zu verbinden und somit eine makroskopische Supraleitung zu erzeugen. Die magnetische Ordnung, welche in den mikroskopischen Bereichen niedriger Dotierung unterhalb von  $T_N$  existiert, verschwindet in diesem F-Dotierbereich. Ein ähnliches Resultat ergibt sich ebenfalls aus Kernspinresonanzmessungen an einem Teil der  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ -Einkristallserie, welche auch in dieser Arbeit untersucht wurde [207]. Gerade in diesem Dotierbereich, welcher in Hinblick auf die mikroskopischen Cluster einen kritischen Zustand darstellt, würde man erwarten, dass sich die Streuung von wärmetransportierenden Anregungen aufgrund der dadurch entstehenden Streuzentren eher erhöht. Zumindest im elektrischen Transport bestätigt sich dieses Bild, da der spezifische Widerstand für  $x = 3,5$  % die mit Abstand größten Werte der hier untersuchten Dotierreihe zeigt (vgl. Abbildung 5.11a), was auf eine verringerte freie Weglänge der Elektronen hindeutet. Gerade bei  $x = 3,5$  % ergibt sich jedoch ein Maximum der Wärmeleitfähigkeit in Abhängigkeit der Dotierung (vgl. Abbildung 5.31) bzw. ein stark erhöhter Wert bei hohen Temperaturen. Eine genaue Beschreibung aller Einflüsse auf den Wärmetransport bedarf also, wie bereits in Abschnitt 5.3.4 erwähnt, detaillierter theoretischer Modelle. Diese sollten den thermischen Transport in der Anwesenheit nematischer Fluktuationen in ihrer Rolle als potenzielle zusätzliche wärmetransportierende Anregungen bzw. als verantwortlich für erhöhte Streuung beschreiben.

## 6 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden Untersuchungen an topologischen und stark korrelierten Elektronensystemen mithilfe von elektrischen, thermischen und thermoelektrischen Transportmessungen dargestellt und diskutiert. Ein besonderer Fokus lag dabei auf Messungen des Nernst-Effekts in Weyl-Halbmetail-Kandidaten sowie in Elektron-dotierten eisenbasierten Supraleitern. Deshalb wurde diese Arbeit in die Schwerpunkte *Topologische Materialien* (Kapitel 4) und *Eisenbasierte Supraleiter* (Kapitel 5) gegliedert.

Im Rahmen der Untersuchung topologischer Materialien wurden Messungen an zwei Klassen von Weyl-Halbmetail-Kandidaten durchgeführt, wobei der potentiellen Existenz von Weyl-Punkten verschiedene Symmetriebrechungen zugrunde liegen. Die eng verwandten Verbindungen TaAs und TaP brechen mit ihrer Kristallstruktur die Inversionssymmetrie des Systems, der nicht-kollineare Antiferromagnet Mn<sub>3</sub>Ge bricht hingegen aufgrund seiner magnetischen Struktur die Zeitumkehrsymmetrie.

In TaAs und TaP (Abschnitt 4.2) wurde ein anomales Nernst-Signal gemessen, das für tiefe Temperaturen nach einem anfänglichen linearen Anstieg saturiert (vgl. Abbildung 4.6). Da ein anomaler Beitrag zu transversalen Transportkoeffizienten durch die Berry-Krümmung in der Nähe von Weyl-Punkten hervorgerufen werden kann (siehe Abschnitt 2.2), deutet diese außergewöhnliche Abhängigkeit vom Magnetfeld  $B$  darauf hin, dass sich Weyl-Punkte nahe der Fermi-Fläche befinden. Mithilfe eines phänomenologischen Modells wurden die anomalen und normalen Beiträge des Nernst-Signals separiert und es konnte gezeigt werden, dass der anomale Beitrag nur für tiefe Temperaturen auftritt und in einem Bereich von  $T \approx 100$  K (TaAs) bzw.  $T \approx 150$  K (TaP) gänzlich verschwindet (Abbildung 4.7). Diese Temperaturabhängigkeit hängt dabei stark vom Abstand  $\mu$  der Weyl-Punkte zum chemischen Potenzial ab. Nur wenn  $\mu$  im Bereich der thermischen Energie liegt, kommt überhaupt eine Temperaturabhängigkeit zustande (siehe Abbildung 4.8). Dabei erreicht der anomale Beitrag zum Nernst-Signal einen Maximalwert, sobald  $k_B T \approx \mu$  ist. Ist  $k_B T$  kleiner oder größer als  $\mu$ , wird der Beitrag abgeschwächt. Die Energie der Weyl-Punkte kann somit anhand der Position des Maximums des Nernst-Signals in Abhängigkeit der Temperatur bestimmt werden. Die Maxima liegen bei  $T \approx 100$  K (TaP) und  $T \approx 50$  K (TaAs), die Abstände der Weyl-Punkte zur Fermi-Fläche unterscheiden sich in beiden Materialien also deutlich voneinander, was mit Vorhersagen von Bandstrukturechnungen übereinstimmt.

Die Sättigung des Nernst-Signals, welche erst bei hohen Magnetfeldern eintritt, lässt sich ebenfalls durch die Lage des chemischen Potentials erklären, genauer gesagt mit dessen Änderung in Abhängigkeit von  $B$  (vgl. Abbildung 4.9). Durch den Einfluss des Magnetfeldes entfernen sich die Weyl-Punkte im  $\mathbf{k}$ -Raum voneinander. Um die Zahl der Ladungsträger zu erhalten, muss deswegen das chemische Potential absinken. Dadurch nähert es sich den Weyl-Punkten, wodurch das Nernst-Signal ansteigt. Sobald das chemische Potential den Sattelpunkt zwischen den Weyl-Punkten kreuzt, kommt es zu einem Lifshitz-Übergang, bei dem sich die Topologie der Fermi-Fläche ändert. Mit fortsetzender Erhöhung des Magnetfeldes nimmt der Abstand der Weyl-Punkte weiter zu, jedoch bleibt das chemische Potential konstant, wodurch sich das Nernst-Signal ebenfalls nicht weiter ändert und somit saturiert.

In  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  (Kapitel 4.3) wurden ebenfalls Messungen des Nernst-Signals in Abhängigkeit des Magnetfeldes und der Temperatur durchgeführt. Dabei zeigt  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  ein komplett anomales Nernst-Signal mit einem Sprung bei nahezu  $B = 0$  und einer sofortigen Sättigung für alle gemessenen Temperaturen. Im Gegensatz zu TaAs und TaP ist keine normale Komponente erkennbar. Das Nernst-Signal liefert zusammen mit den entsprechenden Daten von spezifischem Widerstand, Hall- und Seebeck-Effekt die Temperaturabhängigkeit des transversalen Peltier-Koeffizienten  $\alpha_{ij}$ . Mithilfe eines minimalen theoretischen Modells der Bandstruktur für zwei Weyl-Punkte in der Nähe der Fermi-Fläche (vgl. Abschnitt 4.3.2 und insbesondere Abbildung 4.17) wurden Anpassungsformeln für den anomalen Hall-Koeffizienten sowie den anomalen transversalen Peltier-Koeffizienten in Abhängigkeit der Temperatur hergeleitet. Aus der Anpassung der temperaturabhängigen Daten von  $\alpha_{ij}$  (siehe Abbildung 4.16e) lassen sich mehrere Anpassungsparameter gewinnen, darunter geometrische Eigenschaften wie die Abstände der Weyl-Punkte zur Fermi-Energie sowie untereinander im  $\mathbf{k}$ -Raum, die Sattelpunktenergie und außerdem Informationen über die Stärke der Berry-Krümmung am Fermi-Niveau. Die erhaltenen geometrischen Parameter der Bandstruktur nahe der Weyl-Punkte stimmen dabei sehr gut mit Bandstrukturechnungen überein. Diese Übereinstimmung konnte ebenfalls in einer Analyse von entsprechenden Daten von  $\alpha_{ij}$  an  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  aus der Literatur erhalten werden. Es konnte bestätigt werden, dass die am nächsten zur Fermi-Energie gelegenen Weyl-Punkte in  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  einen wesentlich größeren Abstand zu dieser aufweisen als in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$ . Außerdem konnte in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  und  $\text{Mn}_3\text{Sn}$ , aufgrund der ähnlichen Zustandsdichte, die Stärke der Berry-Krümmung an der Fermi-Energie verglichen werden. Diese ist in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  wesentlich größer als in  $\text{Mn}_3\text{Sn}$ , was ebenfalls mit Kalkulationen übereinstimmt (vgl. Abschnitt 4.3.3). Ferner lässt sich die Temperaturabhängigkeit der anomalen Hall-Leitfähigkeit  $\sigma_{ij}$  mithilfe der gewonnenen geometrischen Parameter in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  anpassen (siehe Abschnitt 4.3.3).

Außerdem wurde eine genauere Untersuchung der Daten des anomalen Nernst-Signals bei sehr kleinen Magnetfeldern vorgenommen. Sie zeigen dabei ein hysteretisches Verhalten mit einer von der Temperatur unabhängigen Feldausdehnung (siehe Abbildung 4.21a). Dieser Hysterese-Kreislauf stimmt nicht mit dem der ferromagnetischen Rest-Magnetisierung  $M$  über-

ein (vgl. Abbildung 4.21b), vielmehr verhält sich das Nernst-Signal komplett unabhängig von  $M$  (Abbildung 4.21c). Diese Ergebnisse zeigen erneut, dass der anomale Nernst-Effekt ein eindeutiger Hinweis auf Weyl-Punkte in der Nähe der Fermi-Energie ist und durch das ferromagnetische Moment hervorgerufen wird. Das Nernst-Signal liefert in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  vielmehr quantitative Aussagen über wichtige geometrische Eigenschaften der Bandstruktur im Impulsraum wie z.B. die Weyl-Punkt-Energie sowie über die Stärke der Berry-Krümmung.

Zur Untersuchung eisenbasierter Supraleiter wurden Transportmessungen mit speziellem Fokus auf dem Nernst-Effekt an einer mit Co dotierten Probenreihe von  $\text{LaFeAsO}$  durchgeführt (Kapitel 5). Dabei wurde insbesondere der Einfluss nematischer Fluktuationen auf die Transportkoeffizienten ergründet. In  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  sind ungewöhnlich große Nernst-Koeffizienten  $\nu$  nachweisbar, welche besonders für hohe Temperaturen im gesamten untersuchten Bereich des Phasendiagramms auftreten (siehe Abbildung 5.18b). Mithilfe eines minimalen *tight binding*-Modells, welches zwei Bänder berücksichtigt, wurden die Transportkoeffizienten in Abhängigkeit einer nematischen Kopplungsstärke  $g$  simuliert (vgl. Abschnitt 5.3.3). Dabei reagiert der Nernst-Koeffizient besonders sensitiv auf eine nematische Kopplung und wird bereits für kleine Werte von  $g$  stark erhöht (Abbildung 5.20a). Somit konnte gezeigt werden, dass der Nernst-Effekt als Sonde nematischer Fluktuationen eingesetzt werden kann. Ferner lässt sich mithilfe des theoretischen Modells auch eine Abhängigkeit von  $\nu$  von der Dotierung simulieren. Für diese wird ein nicht-monotoner Verlauf mit einem Maximum vorhergesagt, das im Bereich der optimalen Dotierung liegt, welche die größte supraleitende Übergangstemperatur aufweist. In der Tat zeigen die experimentellen Daten in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  eine nicht-monotone Abhängigkeit von der Co-Konzentration besonders bei hohen Temperaturen mit einer zusätzlichen Erhöhung im Bereich optimaler Dotierung (siehe Abbildung 5.23) und es deutet sich ein doppeltes Maximum an, welches eine starke Ähnlichkeit mit Elasto-Widerstandsdaten aus Ref. [208] aufweist (vgl. Abbildung 5.24). Diese qualitative Übereinstimmung mit einer Messmethode, welche weithin als direkter Zugang zu nematischen Fluktuationen akzeptiert ist, bestätigt zusätzlich den Einfluss selbiger auf den Nernst-Effekt.

Anhand des Vergleichs mit Messungen des Nernst-Koeffizienten in Rh-dotiertem  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  aus Ref. [73] und [217] konnte gezeigt werden, dass dieses Verhalten in Abhängigkeit der Dotierung universell in zwei verschiedenen Familien der eisenbasierten Supraleiter auftritt. In  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  zeigen sich ein noch deutlicheres Maximum des Nernst-Koeffizienten über dem supraleitenden Dom und außerdem ähnliche Abhängigkeiten von der Temperatur (vgl. Abbildung 5.25). Elasto-Widerstands-Messungen an  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  weisen jedoch eindeutig eine Erhöhung im unterdotierten Bereich auf (Abbildung 5.26) und stimmen somit nicht qualitativ mit der Dotierabhängigkeit des Nernst-Koeffizienten überein. Dies steht im Gegensatz der Übereinstimmung der beiden Größen in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  und lässt sich mit der Erkenntnis aus Elasto-Seebeck- und Elasto-Nernst-Messungen aus Ref. [224] erklären (vgl. Abbildung 5.27). Es zeigt sich, dass zur vollständigen Beschreibung des Einflusses nematischer Fluktuationen

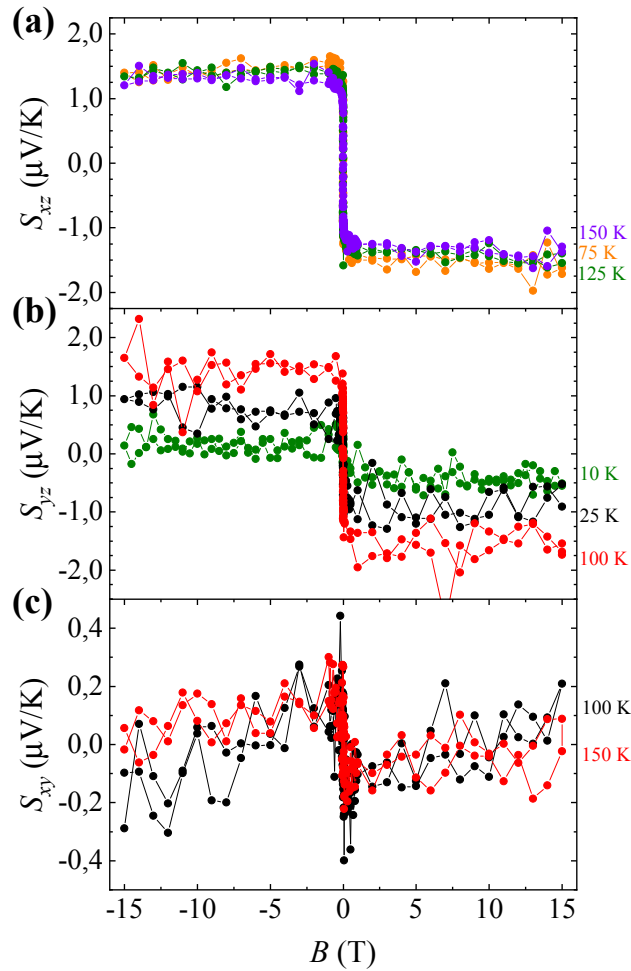
sowohl der Elasto-Widerstand als auch der Elasto-Peltier-Effekt berücksichtigt werden müssen, da sich eine anisotrope Streuzeit sowie Anisotropien auf der Fermi-Fläche unterschiedlich auf beide Effekte auswirken. Somit erhält man in manchen Systemen keinen vollständigen Einblick in das nematische Fluktuationsregime allein durch Messungen des Elasto-Widerstands. Zusätzlich benötigen Elasto-Transportkoeffizienten eine Kopplung an das Kristallgitter, welche mit steigender Dotierung und damit einhergehender Entfernung vom strukturellen Phasenübergang abnimmt (vgl. Abschnitt 5.3.3). Dies ist für den Nernst-Effekt jedoch nicht der Fall. Deshalb kann aus den hier vorgestellten Messungen, theoretischen Betrachtungen und Vergleichen mit anderen Messmethoden geschlussfolgert werden, dass der Nernst-Effekt eine extrem sensitive Sonde nematischer Fluktuationen und essentiell für das Verständnis der Supraleitung ist.

Zusätzlich wurden Messungen der Wärmeleitfähigkeit  $\kappa$  in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  ausgewertet, diskutiert und mit eben solchen in  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Rh}_x)_2\text{As}_2$  verglichen. Auch  $\kappa$  zeigt ungewöhnliche Verläufe in Abhängigkeit der Temperatur, welche sich in beiden Systemen ähneln und ebenfalls eine nicht-monotone Abhängigkeit von der Dotierung aufweisen (vgl. Abschnitt 5.3.4). Letztere legt aufgrund der Ähnlichkeit zu den Dotierverhalten des Nernst-Effekts und des Elasto-Widerstands einen Einfluss nematischer Fluktuationen auf die Wärmeleitfähigkeit nahe. Ob dieser Einfluss über eine verstärkte dotierabhängige Streuung an oder einen Zusatzbeitrag durch nematische Fluktuationen hervorgerufen wird, kann jedoch ohne theoretische Unterstützung nicht abschließend geklärt werden.

Anhand der in dieser Arbeit vorgestellten Transportmessungen an eisenbasierten Supraleitern wird erneut verdeutlicht, dass aufgrund der starken elektronischen Korrelationen einzelne Messsonden nicht ausreichen, um die komplexen Wechselwirkungen in diesen Systemen zu entschlüsseln. Nichtsdestotrotz liefert insbesondere der Nernst-Effekt einen wichtigen zusätzlichen Beitrag zum Verständnis der nematischen Fluktuationen und ihres Einflusses auf die Supraleitung und sollte deshalb systematisch in Hochtemperatur-Supraleitern als sensitive Sonde zum Einsatz kommen.

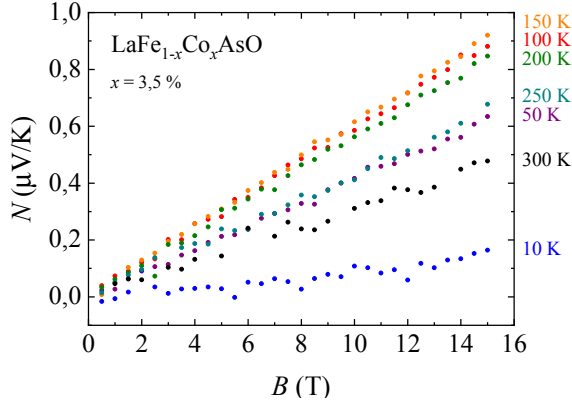
# A Anhang

## A.1 Nernst-Signal in $\text{Mn}_3\text{Ge}$

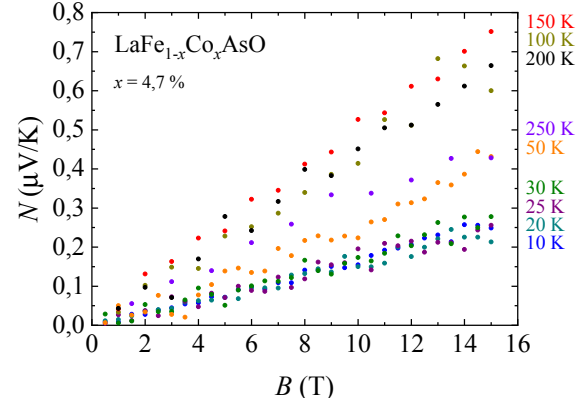


**Abbildung A.1:** (a)-(c) Nernst-Signal in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  in Abhängigkeit des Magnetfeldes für verschiedene Messkonfigurationen und ausgewählte Temperaturen (Ergänzung zu Abbildung 4.16).  $S_{ij}$  resultiert aus einer Messung der Spannung entlang der  $i$ -Richtung mit einem Temperaturgradienten entlang der  $j$ - und einem Magnetfeld entlang der  $k$ -Richtung.

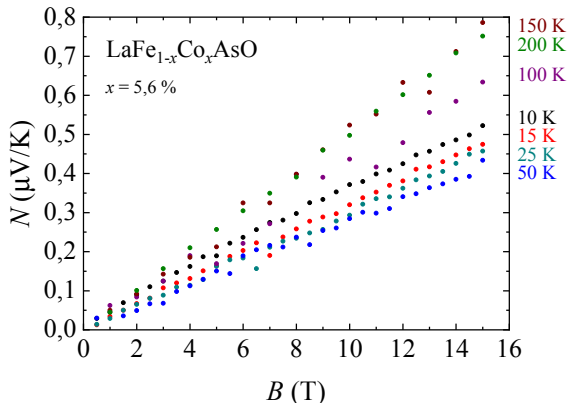
## A.2 Nernst-Signal in $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$



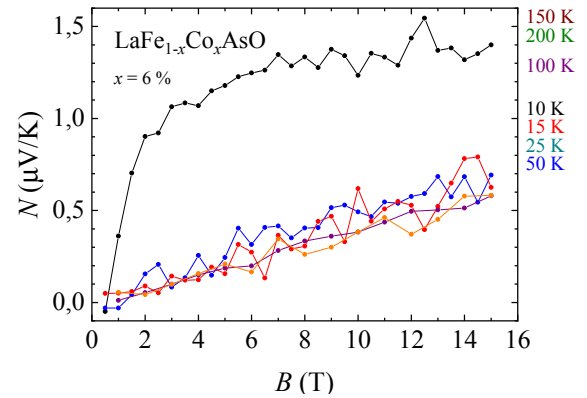
(a) Nernst-Signal  $N$  von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  mit  $x = 3,5 \%$  in Abhängigkeit des Magnetfeldes für unterschiedliche konstante Temperaturen.



(b) Nernst-Signal  $N$  von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  mit  $x = 4,7 \%$  in Abhängigkeit des Magnetfeldes für unterschiedliche konstante Temperaturen.



(c) Nernst-Signal  $N$  von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  mit  $x = 5,6 \%$  in Abhängigkeit des Magnetfeldes für unterschiedliche konstante Temperaturen.



(d) Nernst-Signal  $N$  von  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  mit  $x = 6 \%$  in Abhängigkeit des Magnetfeldes für unterschiedliche konstante Temperaturen.

**Abbildung A.2:** Nernst-Signal in Abhängigkeit des Magnetfeldes in  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  für ausgewählte Co-Dotierstufen.

# Literaturverzeichnis

- [1] A. Wulf, *Alexander von Humboldt und die Erfindung der Natur* - (C. Bertelsmann Verlag, München, 2016).
- [2] Y. Tokura, M. Kawasaki, and N. Nagaosa, *Nature Physics* **13**, 1056 (2017).
- [3] J. C. S. Davis and D.-H. Lee, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **110**, 17623 (2013).
- [4] B. Yan and C. Felser, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **8**, 337 (2017).
- [5] A. v. Ettingshausen and W. Nernst, *Annalen der Physik und Chemie* **265**, 343 (1886).
- [6] W. Nernst, *Annalen der Physik und Chemie* **267**, 760 (1887).
- [7] R. Gross and A. Marx, *Festkörperphysik*, 2nd ed. (DE GRUYTER OLDENBOURG, 2014).
- [8] K. Behnia, *Fundamentals of Thermoelectricity*, 1st ed. (Oxford: University Press, 2015).
- [9] J. Ziman, *Electrons and Phonons* (Oxford: University Press, 2001).
- [10] J. M. Ziman, *Prinzipien der Festkörpertheorie* (Frankfurt am Main: Harri Deutsch, 1999).
- [11] K. Behnia, *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**, 113101 (2009).
- [12] N. W. A. und D. N. Mermin, *Festkörperphysik* (München: Oldenburg Verlag, 2013).
- [13] I. A. Campbell, *Transport Properties of Ferromagnets*, Ferromagnetic Materials, Vol. 3 (Amsterdam: North-Holland, 1982).
- [14] H. Kontani, *Transport Phenomena in Strongly Correlated Fermi Liquids* (Berlin: Springer Verlag, 2013).
- [15] P. Anderson, *Physical Review Letters* **67**, 2092 (1991).
- [16] Y. Dagan and R. L. Greene, *Physical Review B* **76** (2007), 10.1103/physrevb.76.024506.



- [17] E. Arushanov, S. Levchenko, G. Fuchs, B. Holzapfel, S. L. Drechsler, and L. Schultz, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **24**, 2285 (2011).
- [18] A. F. Wang, J. J. Ying, X. G. Luo, Y. J. Yan, D. Y. Liu, Z. J. Xiang, P. Cheng, G. J. Ye, L. J. Zou, Z. Sun, and X. H. Chen, *New Journal of Physics* **15**, 043048 (2013).
- [19] C. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik*, 14th ed. (Oldenburg Verlag München, 2006).
- [20] C. Hess, B. Büchner, U. Ammerahl, L. Colonescu, F. Heidrich-Meisner, W. Brenig, and A. Revcolevschi, *Physical Review Letters* **90** (2003), 10.1103/physrevlett.90.197002.
- [21] F. Steckel, A. Matsumoto, T. Takayama, H. Takagi, B. Büchner, and C. Hess, *EPL (Europhysics Letters)* **114**, 57007 (2016).
- [22] J. Bardeen, G. Rickayzen, and L. Tewordt, *Physical Review* **113**, 982 (1959).
- [23] G. D. CODY and R. W. COHEN, *Reviews of Modern Physics* **36**, 121 (1964).
- [24] J. K. Hulm, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **204**, 98 (1950).
- [25] J. L. Olsen, *Proceedings of the Physical Society. Section A* **65**, 518 (1952).
- [26] V. Bayot, F. Delannay, C. Dewitte, J.-P. Erauw, X. Gonze, J.-P. Issi, A. Jonas, M. Kinany-Alaoui, M. Lambricht, J.-P. Michenaud, J.-P. Minet, and L. Piraux, *Solid State Communications* **63**, 983 (1987).
- [27] S. D. Peacor and C. Uher, *Physical Review B* **39**, 11559 (1989).
- [28] R. C. Yu, M. B. Salamon, J. P. Lu, and W. C. Lee, *Physical Review Letters* **69**, 1431 (1992).
- [29] R. Movshovich, M. Jaime, J. D. Thompson, C. Petrovic, Z. Fisk, P. G. Pagliuso, and J. L. Sarrao, *Physical Review Letters* **86**, 5152 (2001).
- [30] A. F. May, M. A. McGuire, J. E. Mitchell, A. S. Sefat, and B. C. Sales, *Physical Review B* **88** (2013), 10.1103/physrevb.88.064502.
- [31] J. G. Checkelsky, R. Thomale, L. Li, G. F. Chen, J. L. Luo, N. L. Wang, and N. P. Ong, *Physical Review B* **86** (2012), 10.1103/physrevb.86.180502.
- [32] Y. Nakajima, Y. Kurosaki, and T. Tamegai, *Journal of Physics: Conference Series* **400**, 022080 (2012).

- [33] N. Hlubek, P. Ribeiro, R. Saint-Martin, A. Revcolevschi, G. Roth, G. Behr, B. Büchner, and C. Hess, *Physical Review B* **81** (2010), 10.1103/physrevb.81.020405.
- [34] A. Freimuth, M. Galffy, C. Hohn, and B. Zeini, *Journal of Low Temperature Physics* **95**, 383 (1994).
- [35] C. Strohm, G. L. J. A. Rikken, and P. Wyder, *Physical Review Letters* **95** (2005), 10.1103/physrevlett.95.155901.
- [36] K. Sugii, M. Shimozawa, D. Watanabe, Y. Suzuki, M. Halim, M. Kimata, Y. Matsumoto, S. Nakatsuji, and M. Yamashita, *Physical Review Letters* **118** (2017), 10.1103/physrevlett.118.145902.
- [37] X. Li, B. Fauqué, Z. Zhu, and K. Behnia, *Physical Review Letters* **124** (2020), 10.1103/physrevlett.124.105901.
- [38] G. Grissonnanche, S. Thériault, A. Gourgout, M. E. Boulanger, E. Lefrançois, A. Ataei, F. Laliberté, M. Dion, J. S. Zhou, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, N. Doiron-Leyraud, and L. Taillefer, “Phonons become chiral in the pseudogap phase of cuprates,” (2020), arXiv:2003.00111 .
- [39] P. W. Bridgman, *Physical Review* **24**, 644 (1924).
- [40] S. Fujimoto, *Physical Review Letters* **103** (2009), 10.1103/physrevlett.103.047203.
- [41] Y. Onose, T. Ideue, H. Katsura, Y. Shiomi, N. Nagaosa, and Y. Tokura, *Science* **329**, 297 (2010).
- [42] T. Ideue, Y. Onose, H. Katsura, Y. Shiomi, S. Ishiwata, N. Nagaosa, and Y. Tokura, *Physical Review B* **85** (2012), 10.1103/physrevb.85.134411.
- [43] G. Grissonnanche, A. Legros, S. Badoux, E. Lefrançois, V. Zatkó, M. Lizaire, F. Laliberté, A. Gourgout, J.-S. Zhou, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, S. Ono, N. Doiron-Leyraud, and L. Taillefer, *Nature* **571**, 376 (2019).
- [44] M. Matusiak, E. Pomjakushina, and K. Conder, *Physica C: Superconductivity* **483**, 21 (2012).
- [45] Y. Wang, Z. A. Xu, T. Kakeshita, S. Uchida, S. Ono, Y. Ando, and N. P. Ong, *Physical Review B* **64** (2001), 10.1103/physrevb.64.224519.
- [46] R. Bel, K. Behnia, and H. Berger, *Physical Review Letters* **91** (2003), 10.1103/physrevlett.91.066602.

- [47] R. Daou, J. Chang, D. LeBoeuf, O. Cyr-Choinière, F. Laliberté, N. Doiron-Leyraud, B. J. Ramshaw, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, and L. Taillefer, *Nature* **463**, 519 (2010).
- [48] K. Behnia, M.-A. Méasson, and Y. Kopelevich, *Physical Review Letters* **98** (2007), 10.1103/physrevlett.98.076603.
- [49] J. H. Mangenz, J. P. Issi, and J. Heremans, *Physical Review B* **14**, 4381 (1976).
- [50] M. Matusiak, Z. Bukowski, and J. Karpinski, *Physical Review B* **81** (2010), 10.1103/physrevb.81.020510.
- [51] M. Matusiak, Z. Bukowski, and J. Karpinski, *Physical Review B* **83** (2011), 10.1103/physrevb.83.224505.
- [52] A. Hackl and S. Sachdev, *Physical Review B* **79** (2009), 10.1103/physrevb.79.235124.
- [53] Y. Wang, L. Li, and N. P. Ong, *Physical Review B* **73** (2006), 10.1103/physrevb.73.024510.
- [54] O. Cyr-Choinière, R. Daou, F. Laliberté, C. Collignon, S. Badoux, D. LeBoeuf, J. Chang, B. J. Ramshaw, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, J.-Q. Yan, J.-G. Cheng, J.-S. Zhou, J. B. Goodenough, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, N. Doiron-Leyraud, and L. Taillefer, *Physical Review B* **97** (2018), 10.1103/physrevb.97.064502.
- [55] O. Cyr-Choinière, R. Daou, F. Laliberté, D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud, J. Chang, J.-Q. Yan, J.-G. Cheng, J.-S. Zhou, J. B. Goodenough, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, Y. Tanaka, and L. Taillefer, *Nature* **458**, 743 (2009).
- [56] A. Hackl, M. Vojta, and S. Sachdev, *Physical Review B* **81** (2010), 10.1103/physrevb.81.045102.
- [57] M. Breitzkreiz, P. M. R. Brydon, and C. Timm, *Physical Review B* **89** (2014), 10.1103/physrevb.89.245106.
- [58] M. Breitzkreiz, P. M. R. Brydon, and C. Timm, *Physical Review B* **88** (2013), 10.1103/physrevb.88.085103.
- [59] M. V. Berry, *Proc. R. Soc. Lond. A* **392** (1984).
- [60] D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1959 (2010).
- [61] X. G. Wen, F. Wilczek, and A. Zee, *Physical Review B* **39**, 11413 (1989).
- [62] V. Fock, *Zeitschrift für Physik* **49**, 323 (1928).

- [63] R. Kubo, Journal of the Physical Society of Japan **12**, 570 (1957), <https://doi.org/10.1143/JPSJ.12.570> .
- [64] Z. Fang, N. Nagaosa, K. S. Takahashi, A. Asamitsu, R. Mathieu, T. Ogasawara, H. Yamada, M. Kawasaki, Y. Tokura, and K. Terakura, Science **302**, 92 (2003), <https://science.sciencemag.org/content/302/5642/92.full.pdf> .
- [65] Y. Yao, L. Kleinman, A. H. MacDonald, J. Sinova, T. Jungwirth, D.-s. Wang, E. Wang, and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **92**, 037204 (2004).
- [66] E. Hall, The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science **12**, 157 (1881).
- [67] A. W. Smith, Physical Review (Series I) **30**, 1 (1910).
- [68] E. M. Pugh and N. Rostoker, Reviews of Modern Physics **25**, 151 (1953).
- [69] R. Karplus and J. M. Luttinger, Physical Review **95**, 1154 (1954).
- [70] D. Xiao, Y. Yao, Z. Fang, and Q. Niu, Physical Review Letters **97** (2006), 10.1103/physrevlett.97.026603.
- [71] F. D. M. Haldane, Physical Review Letters **93** (2004), 10.1103/physrevlett.93.206602.
- [72] C. Hess, *Thermischer Transport in Übergangsmetalloxiden mit niedrigdimensionalen Ladungs- und Spinstrukturen*, Ph.D. thesis, Universität Köln (2002).
- [73] F. Steckel, *Thermische und elektrische Transportuntersuchungen an niederdimensionalen korrelierten Elektronensystemen*, Ph.D. thesis, TU Dresden (2015).
- [74] N. Hlubek, *Magnetic heat transport in one-dimensional quantum antiferromagnets*, Ph.D. thesis, TU Dresden (2010).
- [75] P. A. Tipler and G. Mosca, *Physik*, 2nd ed. (Heidelberg : Spektrum, Akad. Verl., 2007).
- [76] Keithley, *User's Manual Model 2400 SourceMeter* ().
- [77] Keithley, *User's Manual Model 2182 Nanovoltmeter* ().
- [78] Lakeshore, *User's Manual Model 340 Temperature Controller*.
- [79] P. A. M. Dirac, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character **117**, 610 (1928).
- [80] N. P. Armitage, E. J. Mele, and A. Vishwanath, Rev. Mod. Phys. **90**, 015001 (2018).
- [81] H. Weyl, Proceedings of the National Academy of Sciences **15**, 323 (1929).

- [82] S. M. Young, S. Zaheer, J. C. Y. Teo, C. L. Kane, E. J. Mele, and A. M. Rappe, *Physical Review Letters* **108** (2012), 10.1103/physrevlett.108.140405.
- [83] S.-M. Huang, S.-Y. Xu, I. Belopolski, C.-C. Lee, G. Chang, B. Wang, N. Alidoust, G. Bian, M. Neupane, C. Zhang, S. Jia, A. Bansil, H. Lin, and M. Z. Hasan, *Nature Communications* **6** (2015), 10.1038/ncomms8373.
- [84] M. Z. Hasan, S.-Y. Xu, I. Belopolski, and S.-M. Huang, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **8**, 289 (2017).
- [85] H. Nielsen and M. Ninomiya, *Physics Letters B* **130**, 389 (1983).
- [86] D. T. Son and B. Z. Spivak, *Physical Review B* **88** (2013), 10.1103/physrevb.88.104412.
- [87] X. Huang, L. Zhao, Y. Long, P. Wang, D. Chen, Z. Yang, H. Liang, M. Xue, H. Weng, Z. Fang, X. Dai, and G. Chen, *Physical Review X* **5** (2015), 10.1103/physrevx.5.031023.
- [88] C.-L. Zhang, S.-Y. Xu, I. Belopolski, Z. Yuan, Z. Lin, B. Tong, G. Bian, N. Alidoust, C.-C. Lee, S.-M. Huang, T.-R. Chang, G. Chang, C.-H. Hsu, H.-T. Jeng, M. Neupane, D. S. Sanchez, H. Zheng, J. Wang, H. Lin, C. Zhang, H.-Z. Lu, S.-Q. Shen, T. Neupert, M. Z. Hasan, and S. Jia, *Nature Communications* **7** (2016), 10.1038/ncomms10735.
- [89] Y. Luo, N. J. Ghimire, M. Wartenbe, H. Choi, M. Neupane, R. D. McDonald, E. D. Bauer, J. Zhu, J. D. Thompson, and F. Ronning, *Physical Review B* **92** (2015), 10.1103/physrevb.92.205134.
- [90] R. D. dos Reis, M. O. Ajeesh, N. Kumar, F. Arnold, C. Shekhar, M. Naumann, M. Schmidt, M. Nicklas, and E. Hassinger, *New Journal of Physics* **18**, 085006 (2016).
- [91] A. Knoll, C. Timm, and T. Meng, *Physical Review B* **101** (2020), 10.1103/physrevb.101.201402.
- [92] B. Lv, T. Qian, and H. Ding, *Nature Reviews Physics* **1**, 609 (2019).
- [93] G. Sharma, P. Goswami, and S. Tewari, *Phys. Rev. B* **93**, 035116 (2016).
- [94] R. Lundgren, P. Laurell, and G. A. Fiete, *Physical Review B* **90** (2014), 10.1103/physrevb.90.165115.
- [95] G. Sharma, C. Moore, S. Saha, and S. Tewari, *Physical Review B* **96** (2017), 10.1103/physrevb.96.195119.
- [96] Y. Ferreiros, A. A. Zyuzin, and J. H. Bardarson, *Physical Review B* **96** (2017), 10.1103/physrevb.96.115202.

- [97] H. Weng, C. Fang, Z. Fang, B. A. Bernevig, and X. Dai, *Physical Review X* **5** (2015), 10.1103/physrevx.5.011029.
- [98] S.-Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust, M. Neupane, G. Bian, C. Zhang, R. Sankar, G. Chang, Z. Yuan, C.-C. Lee, S.-M. Huang, H. Zheng, J. Ma, D. S. Sanchez, B. Wang, A. Bansil, F. Chou, P. P. Shibayev, H. Lin, S. Jia, and M. Z. Hasan, *Science* **349**, 613 (2015).
- [99] B. Lv, H. Weng, B. Fu, X. Wang, H. Miao, J. Ma, P. Richard, X. Huang, L. Zhao, G. Chen, Z. Fang, X. Dai, T. Qian, and H. Ding, *Physical Review X* **5** (2015), 10.1103/physrevx.5.031013.
- [100] S.-Y. Xu, N. Alidoust, I. Belopolski, Z. Yuan, G. Bian, T.-R. Chang, H. Zheng, V. N. Strocov, D. S. Sanchez, G. Chang, C. Zhang, D. Mou, Y. Wu, L. Huang, C.-C. Lee, S.-M. Huang, B. Wang, A. Bansil, H.-T. Jeng, T. Neupert, A. Kaminski, H. Lin, S. Jia, and M. Z. Hasan, *Nature Physics* **11**, 748 (2015).
- [101] S.-Y. Xu, I. Belopolski, D. S. Sanchez, C. Zhang, G. Chang, C. Guo, G. Bian, Z. Yuan, H. Lu, T.-R. Chang, P. P. Shibayev, M. L. Prokopovych, N. Alidoust, H. Zheng, C.-C. Lee, S.-M. Huang, R. Sankar, F. Chou, C.-H. Hsu, H.-T. Jeng, A. Bansil, T. Neupert, V. N. Strocov, H. Lin, S. Jia, and M. Z. Hasan, *Science Advances* **1**, e1501092 (2015).
- [102] I. Belopolski, S.-Y. Xu, D. S. Sanchez, G. Chang, C. Guo, M. Neupane, H. Zheng, C.-C. Lee, S.-M. Huang, G. Bian, N. Alidoust, T.-R. Chang, B. Wang, X. Zhang, A. Bansil, H.-T. Jeng, H. Lin, S. Jia, and M. Z. Hasan, *Physical Review Letters* **116** (2016), 10.1103/physrevlett.116.066802.
- [103] L. X. Yang, Z. K. Liu, Y. Sun, H. Peng, H. F. Yang, T. Zhang, B. Zhou, Y. Zhang, Y. F. Guo, M. Rahn, D. Prabhakaran, Z. Hussain, S.-K. Mo, C. Felser, B. Yan, and Y. L. Chen, *Nature Physics* **11**, 728 EP (2015).
- [104] F. Arnold, M. Naumann, S.-C. Wu, Y. Sun, M. Schmidt, H. Borrmann, C. Felser, B. Yan, and E. Hassinger, *Physical Review Letters* **117** (2016), 10.1103/physrevlett.117.146401.
- [105] F. Arnold, C. Shekhar, S.-C. Wu, Y. Sun, R. D. dos Reis, N. Kumar, M. Naumann, M. O. Ajeesh, M. Schmidt, A. G. Grushin, J. H. Bardarson, M. Baenitz, D. Sokolov, H. Borrmann, M. Nicklas, C. Felser, E. Hassinger, and B. Yan, *Nature Communications* **7** (2016), 10.1038/ncomms11615.
- [106] F. Caglieris, C. Wuttke, S. Sykora, V. Süß, C. Shekhar, C. Felser, B. Büchner, and C. Hess, *Phys. Rev. B* **98**, 201107(R) (2018).
- [107] T. Liang, J. Lin, Q. Gibson, T. Gao, M. Hirschberger, M. Liu, R. Cava, and N. Ong, *Physical Review Letters* **118** (2017), 10.1103/physrevlett.118.136601.

- [108] C. Shekhar, V. Süß, and M. Schmidt, “Mobility induced unsaturated high linear magnetoresistance in transition-metal monpnictides weyl semimetals,” (2016), arXiv:1606.06649 [cond-mat.mtrl-sci] .
- [109] Z. Wang, Y. Zheng, Z. Shen, Y. Lu, H. Fang, F. Sheng, Y. Zhou, X. Yang, Y. Li, C. Feng, and Z.-A. Xu, *Physical Review B* **93** (2016), 10.1103/physrevb.93.121112.
- [110] C. Shekhar, A. K. Nayak, Y. Sun, M. Schmidt, M. Nicklas, I. Leermakers, U. Zeitler, Y. Skourski, J. Wosnitza, Z. Liu, Y. Chen, W. Schnelle, H. Borrmann, Y. Grin, C. Felser, and B. Yan, *Nature Physics* **11**, 645 (2015).
- [111] C.-C. Lee, S.-Y. Xu, S.-M. Huang, D. S. Sanchez, I. Belopolski, G. Chang, G. Bian, N. Alidoust, H. Zheng, M. Neupane, B. Wang, A. Bansil, M. Z. Hasan, and H. Lin, *Physical Review B* **92** (2015), 10.1103/physrevb.92.235104.
- [112] C. Wuttke, F. Caglieris, S. Sykora, F. Scaravaggi, A. U. B. Wolter, K. Manna, V. Süß, C. Shekhar, C. Felser, B. Büchner, and C. Hess, *Phys. Rev. B* **100**, 085111 (2019).
- [113] A. K. Nayak, J. E. Fischer, Y. Sun, B. Yan, J. Karel, A. C. Komarek, C. Shekhar, N. Kumar, W. Schnelle, J. Kübler, C. Felser, and S. S. P. Parkin, *Science Advances* **2** (2016), 10.1126/sciadv.1501870.
- [114] S. Nakatsuji, N. Kiyohara, and T. Higo, *Nature* **527**, 212 EP (2015).
- [115] N. Kiyohara, T. Tomita, and S. Nakatsuji, *Physical Review Applied* **5** (2016), 10.1103/physrevapplied.5.064009.
- [116] M. Ikhlas, T. Tomita, T. Koretsune, M.-T. Suzuki, D. Nishio-Hamane, R. Arita, Y. Otani, and S. Nakatsuji, *Nature Physics* **13**, 1085 EP (2017).
- [117] X. Li, L. Xu, L. Ding, J. Wang, M. Shen, X. Lu, Z. Zhu, and K. Behnia, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 056601 (2017).
- [118] H. Chen, Q. Niu, and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 017205 (2014).
- [119] G.-Y. Guo and T.-C. Wang, *Phys. Rev. B* **96**, 224415 (2017).
- [120] M. Kimata, H. Chen, K. Kondou, S. Sugimoto, P. K. Muduli, M. Ikhlas, Y. Omori, T. Tomita, A. H. MacDonald, S. Nakatsuji, and Y. Otani, *Nature* (2019), 10.1038/s41586-018-0853-0.
- [121] P. J. Brown, V. Nunez, F. Tasset, J. B. Forsyth, and P. Radhakrishna, *Journal of Physics: Condensed Matter* **2**, 9409 (1990).

- [122] W. J. Feng, D. Li, W. J. Ren, Y. B. Li, W. F. Li, J. Li, Y. Q. Zhang, and Z. D. Zhang, Phys. Rev. B **73**, 205105 (2006).
- [123] J. F. Qian, A. K. Nayak, G. Kreiner, W. Schnelle, and C. Felser, Journal of Physics D: Applied Physics **47**, 305001 (2014).
- [124] N. Yamada, H. Sakai, H. Mori, and T. Ohoyama, Physica B+C **149**, 311 (1988).
- [125] S. Tomiyoshi and Y. Yamaguchi, Journal of the Physical Society of Japan **51**, 2478 (1982), <https://doi.org/10.1143/JPSJ.51.2478> .
- [126] T. Nagamiya, S. Tomiyoshi, and Y. Yamaguchi, Solid State Communications **42**, 385 (1982).
- [127] H. Yang, Y. Sun, Y. Zhang, W.-J. Shi, S. S. P. Parkin, and B. Yan, New Journal of Physics **19**, 015008 (2017).
- [128] J. Liu and L. Balents, Physical Review Letters **119** (2017), 10.1103/physrevlett.119.087202.
- [129] S. Tomiyoshi, Y. Yamaguchi, and T. Nagamiya, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **31-34**, 629 (1983).
- [130] M.-T. Suzuki, T. Koretsune, M. Ochi, and R. Arita, Physical Review B **95** (2017), 10.1103/physrevb.95.094406.
- [131] L. Xu, X. Li, X. Lu, C. Collignon, H. Fu, J. Koo, B. Fauqué, B. Yan, Z. Zhu, and K. Behnia, Science Advances **6**, eaaz3522 (2020).
- [132] T. Tomita, M. Ikhlas, and S. Nakatsuji, in *Proceedings of the International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2019)* (Journal of the Physical Society of Japan, 2020).
- [133] A. K. Nayak, M. Nicklas, S. Chadov, P. Khuntia, C. Shekhar, A. Kalache, M. Baenitz, Y. Skourski, V. K. Guduru, A. Puri, U. Zeitler, J. M. D. Coey, and C. Felser, Nature Materials **14**, 679 (2015).
- [134] B. G. Park, J. Wunderlich, X. Martí, V. Holý, Y. Kurosaki, M. Yamada, H. Yamamoto, A. Nishide, J. Hayakawa, H. Takahashi, A. B. Shick, and T. Jungwirth, Nature Materials **10**, 347 (2011).
- [135] X. Marti, I. Fina, C. Frontera, J. Liu, P. Wadley, Q. He, R. J. Paull, J. D. Clarkson, J. Kudrnovský, I. Turek, J. Kuneš, D. Yi, J.-H. Chu, C. T. Nelson, L. You, E. Arenholz, S. Salahuddin, J. Fontcuberta, T. Jungwirth, and R. Ramesh, Nature Materials **13**, 367 (2014).



- [136] S. Mizukami, A. Sakuma, A. Sugihara, T. Kubota, Y. Kondo, H. Tsuchiura, and T. Miyazaki, *Applied Physics Express* **6**, 123002 (2013).
- [137] A. Sakai, Y. P. Mizuta, A. A. Nugroho, R. Sihombing, T. Koretsune, M.-T. Suzuki, N. Takemori, R. Ishii, D. Nishio-Hamane, R. Arita, P. Goswami, and S. Nakatsuji, *Nature Physics* **14**, 1119 (2018).
- [138] S. N. Guin, K. Manna, J. Noky, S. J. Watzman, C. Fu, N. Kumar, W. Schnelle, C. Shekhar, Y. Sun, J. Gooth, and C. Felser, *NPG Asia Materials* **11** (2019), 10.1038/s41427-019-0116-z.
- [139] J. Noky, J. Gayles, C. Felser, and Y. Sun, *Phys. Rev. B* **97**, 220405(R) (2018).
- [140] M. Wu, H. Isshiki, T. Chen, T. Higo, S. Nakatsuji, and Y. Otani, *Applied Physics Letters* **116**, 132408 (2020).
- [141] R. D. dos Reis, M. G. Zavareh, M. O. Ajeesh, L. O. Kutelak, A. S. Sukhanov, S. Singh, J. Noky, Y. Sun, J. E. Fischer, K. Manna, C. Felser, and M. Nicklas, *Physical Review Materials* **4** (2020), 10.1103/physrevmaterials.4.051401.
- [142] C. W. Chu, *Nature Physics* **5**, 787 (2009).
- [143] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono, *Journal of the American Chemical Society* **130**, 3296 (2008).
- [144] C. Wang, L. Li, S. Chi, Z. Zhu, Z. Ren, Y. Li, Y. Wang, X. Lin, Y. Luo, S. Jiang, X. Xu, G. Cao, and Z. Xu, *EPL (Europhysics Letters)* **83**, 67006 (2008).
- [145] G. Wu, Y. L. Xie, H. Chen, M. Zhong, R. H. Liu, B. C. Shi, Q. J. Li, X. F. Wang, T. Wu, Y. J. Yan, J. J. Ying, and X. H. Chen, *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**, 142203 (2009).
- [146] J.-F. Ge, Z.-L. Liu, C. Liu, C.-L. Gao, D. Qian, Q.-K. Xue, Y. Liu, and J.-F. Jia, *Nature Materials* **14**, 285 (2014).
- [147] M. Rotter, M. Tegel, D. Johrendt, I. Schellenberg, W. Hermes, and R. Pöttgen, *Physical Review B* **78** (2008), 10.1103/physrevb.78.020503.
- [148] Q. Huang, Y. Qiu, W. Bao, M. A. Green, J. W. Lynn, Y. C. Gasparovic, T. Wu, G. Wu, and X. H. Chen, *Physical Review Letters* **101** (2008), 10.1103/physrevlett.101.257003.
- [149] L. Wang, F. Hardy, A. E. Böhmer, T. Wolf, P. Schweiss, and C. Meingast, *Physical Review B* **93** (2016), 10.1103/physrevb.93.014514.

- [150] M. Kofu, Y. Qiu, W. Bao, S.-H. Lee, S. Chang, T. Wu, G. Wu, and X. H. Chen, *New Journal of Physics* **11**, 055001 (2009).
- [151] M.-H. Julien, H. Mayaffre, M. Horvatić, C. Berthier, X. D. Zhang, W. Wu, G. F. Chen, N. L. Wang, and J. L. Luo, *EPL (Europhysics Letters)* **87**, 37001 (2009).
- [152] P. C. Canfield and S. L. Bud'ko, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **1**, 27 (2010).
- [153] M. Rotter, M. Pangerl, M. Tegel, and D. Johrendt, *Angewandte Chemie International Edition* **47**, 7949 (2008).
- [154] T. Terashima, M. Kimata, H. Satsukawa, A. Harada, K. Hazama, S. Uji, H. Harima, G.-F. Chen, J.-L. Luo, and N.-L. Wang, *Journal of the Physical Society of Japan* **78**, 063702 (2009).
- [155] H.-J. Grafe, P. Lepucki, M. Witschel, A. P. Dioguardi, R. Kappenberger, S. Aswartham, S. Wurmehl, and B. Büchner, *Physical Review B* **101** (2020), 10.1103/physrevb.101.054519.
- [156] H. Luetkens, H.-H. Klauss, M. Kraken, F. J. Litterst, T. Dellmann, R. Klingeler, C. Hess, R. Khasanov, A. Amato, C. Baines, M. Kosmala, O. J. Schumann, M. Braden, J. Hamann-Borrero, N. Leps, A. Kondrat, G. Behr, J. Werner, and B. Büchner, *Nature Materials* **8**, 305 (2009).
- [157] G. Lang, L. Veyrat, U. Gräfe, F. Hammerath, D. Paar, G. Behr, S. Wurmehl, and H.-J. Grafe, *Physical Review B* **94** (2016), 10.1103/physrevb.94.014514.
- [158] F. Hammerath, U. Gräfe, T. Kühne, H. Kühne, P. L. Kuhns, A. P. Reyes, G. Lang, S. Wurmehl, B. Büchner, P. Carretta, and H.-J. Grafe, *Physical Review B* **88** (2013), 10.1103/physrevb.88.104503.
- [159] G. Prando, T. Hartmann, W. Schottenhamel, Z. Guguchia, S. Sanna, F. Ahn, I. Nekrasov, C. Blum, A. Wolter, S. Wurmehl, R. Khasanov, I. Eremin, and B. Büchner, *Physical Review Letters* **114** (2015), 10.1103/physrevlett.114.247004.
- [160] V. Grinenko, K. Kikoin, S.-L. Drechsler, G. Fuchs, K. Nenkov, S. Wurmehl, F. Hammerath, G. Lang, H.-J. Grafe, B. Holzapfel, J. van den Brink, B. Büchner, and L. Schultz, *Physical Review B* **84** (2011), 10.1103/physrevb.84.134516.
- [161] G. Fuchs, S.-L. Drechsler, N. Kozlova, G. Behr, A. Köhler, J. Werner, K. Nenkov, R. Klingeler, J. Hamann-Borrero, C. Hess, A. Kondrat, M. Grobosch, A. Narduzzo, M. Knupfer, J. Freudenberger, B. Büchner, and L. Schultz, *Physical Review Letters* **101** (2008), 10.1103/physrevlett.101.237003.

- [162] F. Hammerath, S.-L. Drechsler, H.-J. Grafe, G. Lang, G. Fuchs, G. Behr, I. Eremin, M. M. Korshunov, and B. Büchner, *Physical Review B* **81** (2010), 10.1103/physrevb.81.140504.
- [163] L. Wang, S. Sauerland, F. Scaravaggi, R. Kappenberger, S. Aswartham, S. Wurmehl, A. Wolter, B. Büchner, and R. Klingeler, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **482**, 50 (2019).
- [164] T. Nomura, S. W. Kim, Y. Kamihara, M. Hirano, P. V. Sushko, K. Kato, M. Takata, A. L. Shluger, and H. Hosono, *Superconductor Science and Technology* **21**, 125028 (2008).
- [165] S. Sanna, R. D. Renzi, G. Lamura, C. Ferdeghini, A. Palenzona, M. Putti, M. Tropeano, and T. Shiroka, *Physical Review B* **80** (2009), 10.1103/physrevb.80.052503.
- [166] S. Sanna, R. D. Renzi, T. Shiroka, G. Lamura, G. Prando, P. Carretta, M. Putti, A. Martinelli, M. R. Cimberle, M. Tropeano, and A. Palenzona, *Physical Review B* **82** (2010), 10.1103/physrevb.82.060508.
- [167] Y. Zhang, F. Chen, C. He, B. Zhou, B. P. Xie, C. Fang, W. F. Tsai, X. H. Chen, H. Hayashi, J. Jiang, H. Iwasawa, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, J. P. Hu, and D. L. Feng, *Physical Review B* **83** (2011), 10.1103/physrevb.83.054510.
- [168] V. B. Zabolotnyy, D. S. Inosov, D. V. Evtushinsky, A. Koitzsch, A. A. Kordyuk, G. L. Sun, J. T. Park, D. Haug, V. Hinkov, A. V. Boris, C. T. Lin, M. Knupfer, A. N. Yaresko, B. Büchner, A. Varykhalov, R. Follath, and S. V. Borisenko, *Nature* **457**, 569 (2009).
- [169] H. Ding, P. Richard, K. Nakayama, K. Sugawara, T. Arakane, Y. Sekiba, A. Takayama, S. Souma, T. Sato, T. Takahashi, Z. Wang, X. Dai, Z. Fang, G. F. Chen, J. L. Luo, and N. L. Wang, *EPL (Europhysics Letters)* **83**, 47001 (2008).
- [170] M. Yi, D. Lu, J.-H. Chu, J. G. Analytis, A. P. Sorini, A. F. Kemper, B. Moritz, S.-K. Mo, R. G. Moore, M. Hashimoto, W.-S. Lee, Z. Hussain, T. P. Devereaux, I. R. Fisher, and Z.-X. Shen, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **108**, 6878 (2011).
- [171] D. J. Singh and M.-H. Du, *Physical Review Letters* **100** (2008), 10.1103/physrevlett.100.237003.
- [172] P. Larson and S. Satpathy, *Physical Review B* **79** (2009), 10.1103/physrevb.79.054502.
- [173] L. X. Yang, B. P. Xie, Y. Zhang, C. He, Q. Q. Ge, X. F. Wang, X. H. Chen, M. Arita, J. Jiang, K. Shimada, M. Taniguchi, I. Vobornik, G. Rossi, J. P. Hu, D. H. Lu, Z. X. Shen, Z. Y. Lu, and D. L. Feng, *Physical Review B* **82** (2010), 10.1103/physrevb.82.104519.

- [174] C. Liu, Y. Lee, A. D. Palczewski, J.-Q. Yan, T. Kondo, B. N. Harmon, R. W. McCallum, T. A. Lograsso, and A. Kaminski, *Physical Review B* **82** (2010), 10.1103/physrevb.82.075135.
- [175] P. J. Hirschfeld, M. M. Korshunov, and I. I. Mazin, *Reports on Progress in Physics* **74**, 124508 (2011).
- [176] L. Pan, J. Li, Y.-Y. Tai, M. J. Graf, J.-X. Zhu, and C. S. Ting, *Physical Review B* **88** (2013), 10.1103/physrevb.88.214510.
- [177] P. Dai, J. Hu, and E. Dagotto, *Nature Physics* **8**, 709 (2012).
- [178] S. Raghu, X.-L. Qi, C.-X. Liu, D. J. Scalapino, and S.-C. Zhang, *Physical Review B* **77** (2008), 10.1103/physrevb.77.220503.
- [179] R. M. Fernandes and A. V. Chubukov, *Reports on Progress in Physics* **80**, 014503 (2016).
- [180] Y. Ran, F. Wang, H. Zhai, A. Vishwanath, and D.-H. Lee, *Physical Review B* **79** (2009), 10.1103/physrevb.79.014505.
- [181] T. Morinari, E. Kaneshita, and T. Tohyama, *Physical Review Letters* **105** (2010), 10.1103/physrevlett.105.037203.
- [182] J. Knolle, I. Eremin, and R. Moessner, *Physical Review B* **83** (2011), 10.1103/physrevb.83.224503.
- [183] I. Pallecchi, F. Bernardini, F. Caglieris, A. Palenzona, S. Massidda, and M. Putti, *The European Physical Journal B* **86** (2013), 10.1140/epjb/e2013-40148-6.
- [184] J.-H. Chu, J. G. Analytis, K. D. Greve, P. L. McMahon, Z. Islam, Y. Yamamoto, and I. R. Fisher, *Science* **329**, 824 (2010).
- [185] M. Matusiak, M. Babij, and T. Wolf, *Physical Review B* **97** (2018), 10.1103/physrevb.97.100506.
- [186] M. A. Tanatar, E. C. Blomberg, A. Kreyssig, M. G. Kim, N. Ni, A. Thaler, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, A. I. Goldman, I. I. Mazin, and R. Prozorov, *Physical Review B* **81** (2010), 10.1103/physrevb.81.184508.
- [187] E. C. Blomberg, M. A. Tanatar, A. Kreyssig, N. Ni, A. Thaler, R. Hu, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, A. I. Goldman, and R. Prozorov, *Physical Review B* **83** (2011), 10.1103/physrevb.83.134505.
- [188] S. Jiang, H. S. Jeevan, J. Dong, and P. Gegenwart, *Physical Review Letters* **110** (2013), 10.1103/physrevlett.110.067001.

- [189] R. M. Fernandes, A. V. Chubukov, and J. Schmalian, *Nature Physics* **10**, 97 (2014).
- [190] S. Kasahara, H. J. Shi, K. Hashimoto, S. Tonegawa, Y. Mizukami, T. Shibauchi, K. Sugimoto, T. Fukuda, T. Terashima, A. H. Nevidomskyy, and Y. Matsuda, *Nature* **486**, 382 (2012).
- [191] J.-H. Chu, H.-H. Kuo, J. G. Analytis, and I. R. Fisher, *Science* **337**, 710 (2012).
- [192] A. Cano, M. Civelli, I. Eremin, and I. Paul, *Physical Review B* **82** (2010), 10.1103/physrevb.82.020408.
- [193] H.-H. Kuo, J.-H. Chu, J. C. Palmstrom, S. A. Kivelson, and I. R. Fisher, *Science* **352**, 958 (2016).
- [194] S. Lederer, Y. Schattner, E. Berg, and S. Kivelson, *Physical Review Letters* **114** (2015), 10.1103/physrevlett.114.097001.
- [195] M. A. Metlitski, D. F. Mross, S. Sachdev, and T. Senthil, *Physical Review B* **91** (2015), 10.1103/physrevb.91.115111.
- [196] S. Lederer, Y. Schattner, E. Berg, and S. A. Kivelson, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **114**, 4905 (2017).
- [197] Y. Guo, Y. Shi, S. Yu, A. Belik, Y. Matsushita, M. Tanaka, Y. Katsuya, K. Kobayashi, Y. Hata, H. Yasuoka, K. Yamaura, and E. Takayama-Muromachi, *Physica C: Superconductivity and its Applications* **470**, S438 (2010).
- [198] A. S. Sefat, A. Huq, M. A. McGuire, R. Jin, B. C. Sales, D. Mandrus, L. M. D. Cranswick, P. W. Stephens, and K. H. Stone, *Physical Review B* **78** (2008), 10.1103/physrevb.78.104505.
- [199] R. Kappenberger, S. Aswartham, F. Scaravaggi, C. G. Blum, M. I. Sturza, A. U. Wolter, S. Wurmehl, and B. Büchner, *Journal of Crystal Growth* **483**, 9 (2018).
- [200] A. Kondrat, J. E. Hamann-Borrero, N. Leps, M. Kosmala, O. Schumann, A. Köhler, J. Werner, G. Behr, M. Braden, R. Klingeler, B. Büchner, and C. Hess, *The European Physical Journal B* **70**, 461 (2009).
- [201] F. Scaravaggi, S. Sauerland, L. Wang, R. Kappenberger, S. Wurmehl, S. Aswartham, R. Klingeler, A. U. B. Wolter, and B. Büchner, “Revisiting the phase diagram of  $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$  single crystals by thermodynamic methods,” (2020), unpublished.
- [202] H.-H. Klauss, H. Luetkens, R. Klingeler, C. Hess, F. J. Litterst, M. Kraken, M. M. Korshunov, I. Eremin, S.-L. Drechsler, R. Khasanov, A. Amato, J. Hamann-Borrero,

- N. Leps, A. Kondrat, G. Behr, J. Werner, and B. Büchner, *Physical Review Letters* **101** (2008), 10.1103/physrevlett.101.077005.
- [203] C. Hess, A. Kondrat, A. Narduzzo, J. E. Hamann-Borrero, R. Klingeler, J. Werner, G. Behr, and B. Büchner, *EPL (Europhysics Letters)* **87**, 17005 (2009).
- [204] C. Hess, H. Grafe, A. Kondrat, G. Lang, F. Hammerath, L. Wang, R. Klingeler, G. Behr, and B. Büchner, *physica status solidi (b)* **254**, 1600214 (2016).
- [205] C. A. McElroy, J. J. Hamlin, B. D. White, M. A. McGuire, B. C. Sales, and M. B. Maple, *Physical Review B* **88** (2013), 10.1103/physrevb.88.134513.
- [206] F. Ma and Z.-Y. Lu, *Physical Review B* **78** (2008), 10.1103/physrevb.78.033111.
- [207] P. Lepucki, R. Kappenberger, S. Aswartham, S. Wurmehl, R. Havemann, A. P. Dioguardi, B. Büchner, and H.-J. Grafe, “NMR on co-doped LaFeAsO single crystals,” (2020), unpublished.
- [208] X. Hong, F. Caglieris, R. Kappenberger, S. Wurmehl, S. Aswartham, F. Scaravaggi, P. Lepucki, A. U. B. Wolter, H.-J. Grafe, B. Büchner, and C. Hess, *Physical Review Letters* **125** (2020), 10.1103/physrevlett.125.067001.
- [209] M. A. McGuire, A. D. Christianson, A. S. Sefat, B. C. Sales, M. D. Lumsden, R. Jin, E. A. Payzant, D. Mandrus, Y. Luan, V. Keppens, V. Varadarajan, J. W. Brill, R. P. Hermann, M. T. Sougrati, F. Grandjean, and G. J. Long, *Physical Review B* **78** (2008), 10.1103/physrevb.78.094517.
- [210] A. Kondrat, G. Behr, B. Büchner, and C. Hess, *Physical Review B* **83** (2011), 10.1103/physrevb.83.092507.
- [211] X. Zhu, H. Yang, L. Fang, G. Mu, and H.-H. Wen, *Superconductor Science and Technology* **21**, 105001 (2008).
- [212] M. A. McGuire, R. P. Hermann, A. S. Sefat, B. C. Sales, R. Jin, D. Mandrus, F. Grandjean, and G. J. Long, *New Journal of Physics* **11**, 025011 (2009).
- [213] L.-D. Zhao, D. Berardan, and N. Dragoe, *Journal of Alloys and Compounds* **508**, 606 (2010).
- [214] B. Sales, M. McGuire, A. Sefat, and D. Mandrus, *Physica C: Superconductivity* **470**, 304 (2010).
- [215] Y. Kajikawa, *Journal of Applied Physics* **119**, 055702 (2016).

- [216] I. Pallegchi, F. Caglieris, and M. Putti, *Superconductor Science and Technology* **29**, 073002 (2016).
- [217] C. Wuttke, *Thermische und elektrische Transportuntersuchungen an Rhodium-dotiertem  $BaFe_2As_2$* , Master’s thesis, TU Dresden (2016).
- [218] T. Ando, T. Nakanishi, and R. Saito, *Journal of the Physical Society of Japan* **67**, 2857 (1998).
- [219] P. T. Dumitrescu, M. Serbyn, R. T. Scalettar, and A. Vishwanath, *Physical Review B* **94** (2016), 10.1103/physrevb.94.155127.
- [220] H. Yamase and R. Zeyher, *Physical Review B* **88** (2013), 10.1103/physrevb.88.180502.
- [221] N. Ni, A. Thaler, A. Kracher, J. Q. Yan, S. L. Bud’ko, and P. C. Canfield, *Physical Review B* **80** (2009), 10.1103/physrevb.80.024511.
- [222] G. Ghigo, D. Torsello, G. Ummarino, L. Gozzelino, M. Tanatar, R. Prozorov, and P. Canfield, *Physical Review Letters* **121** (2018), 10.1103/physrevlett.121.107001.
- [223] M. Moroni, L. Gozzelino, G. Ghigo, M. A. Tanatar, R. Prozorov, P. C. Canfield, and P. Carretta, *Physical Review B* **96** (2017), 10.1103/physrevb.96.094523.
- [224] F. Caglieris, C. Wuttke, X. Hong, S. Sykora, R. Kappenberger, S. Aswartham, S. Wurmehl, B. Büchner, and C. Hess, “Orbital-driven elasto-seebeck and elasto-nernst effects in 1111 iron based superconductors,” (2019), arXiv:1905.11660 .
- [225] L. Fanfarillo, J. Mansart, P. Toulemonde, H. Cercellier, P. L. Fèvre, F. Bertran, B. Valenzuela, L. Benfatto, and V. Brouet, *Physical Review B* **94** (2016), 10.1103/physrevb.94.155138.
- [226] L. Fanfarillo, L. Benfatto, and B. Valenzuela, *Physical Review B* **97** (2018), 10.1103/physrevb.97.121109.
- [227] R. Fernández-Martín, L. Fanfarillo, L. Benfatto, and B. Valenzuela, *Physical Review B* **99** (2019), 10.1103/physrevb.99.155117.
- [228] M. Tropeano, A. Martinelli, A. Palenzona, E. Bellingeri, E. G. d’Agliano, T. D. Nguyen, M. Affronte, and M. Putti, *Physical Review B* **78** (2008), 10.1103/physrevb.78.094518.
- [229] R. Berman, P. G. Klemens, F. E. Simon, and T. M. Fry, *Nature* **166**, 864 (1950).
- [230] F. L. Ning, K. Ahilan, T. Imai, A. S. Sefat, M. A. McGuire, B. C. Sales, D. Mandrus, P. Cheng, B. Shen, and H.-H. Wen, *Physical Review Letters* **104** (2010), 10.1103/physrevlett.104.037001.

# Liste der Veröffentlichungen

1. "Chemical vapor transport and characterization of  $\text{MnBi}_2\text{Se}_4$ "  
Christian Nowka, Markus Gellesch, Jorge Enrique Hamann Borrero, Sven Partzsch, **Christoph Wuttke**, Frank Steckel, Christian Hess, Anja U.B. Wolter, Laura Teresa Corredor Bohorquez, Bernd Büchner, and Silke Hampel  
Journal of Crystal Growth **459**, 81 (2017),
2. "Anomalous Nernst effect and field-induced Lifshitz transition in the Weyl semimetals TaP and TaAs"  
Federico Caglieris, **Christoph Wuttke**, Steffen Sykora, Vicky Süß, Chandra Shekhar, Claudia Felser, Bernd Büchner, and Christian Hess  
Phys. Rev. B **98**, 201107(R) (2018),
3. "Berry curvature unravelled by the anomalous Nernst effect in  $\text{Mn}_3\text{Ge}$ "  
**Christoph Wuttke**, Federico Caglieris, Steffen Sykora, Francesco Scaravaggi, Anja U. B. Wolter, Kaustuv Manna, Vicky Süß, Chandra Shekhar, Claudia Felser, Bernd Büchner, and Christian Hess  
Phys. Rev. B **100**, 085111 (2019),
4. "Strain-derivative of thermoelectric properties: a sensitive probe for nematicity"  
Federico Caglieris, **Christoph Wuttke**, Xiaochen Hong, Steffen Sykora, Rhea Kappenberger, Saicharan Aswartham, Sabine Wurmehl, Bernd Büchner, and Christian Hess  
Preprint arXiv:1905.11660 (2019),
5. "Nematic fluctuations probed by the Nernst effect"  
**Christoph Wuttke**, Federico Caglieris, Frank Steckel, Xiaochen Hong, Steffen Sykora, Sheng Ran, Seunghyun Khim, Rhea Kappenberger, Christian Blum, Sergey L. Bud'ko, Paul C. Canfield, Sabine Wurmehl, Saicharan Aswartham, Bernd Büchner, and Christian Hess  
In Vorbereitung.



*“Transportation is a precise business.”*

– The Transporter, 2002

# Danksagung

Zuallererst gilt mein Dank Prof. Bernd Büchner für die beständige Förderung und die Möglichkeit, am IFW Dresden zu forschen und meine Doktorarbeit anzufertigen. Sein breites Wissen im gesamten Bereich der Festkörperphysik ließ jede Diskussion mit einem Motivationsschub einhergehen.

Dr. Christian Heß danke ich für die jahrelange Betreuung und wissenschaftliche Unterstützung. Er stellte mich vor 7 Jahren als studentische Hilfskraft ein und versorgte mich mit zahlreichen interessanten Projekten und Fragestellungen, wobei er stets offen für Diskussionen war. Ich wünsche ihm allzeit phänomenale Forschungserfolge als Professor in Wuppertal.

Prof. Rüdiger Klingeler möchte ich außerdem für seine Bereitschaft danken, diese Arbeit zu begutachten.

Dr. Frank Steckel danke ich für die Einführung in die hohe Kunst des Kontaktierens während meiner Zeit als studentische Hilfskraft, in die zahlreichen Mysterien des Nernst-Effektes im Rahmen meiner Masterarbeit sowie für seine Unterstützung und Freundschaft innerhalb und außerhalb des Labors.

Die Gruppe „Transport and Tunneling“ sorgte stets für eine entspannte Arbeitsatmosphäre, für die ich mich herzlich bedanke. Insbesondere der Transportgruppe, bestehend aus Dr. Federico Caglieris, Richard Hentrich, Matthias Gillig, Dr. Xiaochen Hong, Dr. Martina Meineiro, Michael Wißmann und Sanaz Shokri, danke ich für den Zusammenhalt und die vielen entspannten Kochabende. Ich danke außerdem der Transportausflugsgesellschaft für die unvergesslichen Transportausflüge und hoffe, dass noch zahlreiche weitere folgen werden.

Für diese Arbeit gilt mein besonderer Dank Dr. Federico Caglieris und Dr. Frank Steckel für ihre unzähligen Messungen und beständige Motivation, Dr. Steffen Sykora für seine grandiose Theorie-Unterstützung sowohl im Bereich der Weyl-Halbmatalle als auch der eisenbasierten Supraleiter und die zahlreichen Diskussionen und Erklärungen selbiger sowie Dr. Anja Wolter und Francesco Scaravaggi für die Messungen der Magnetisierung. Ohne sie wäre diese Arbeit nicht in dieser Form möglich gewesen.

Für die Bereitstellung der in dieser Arbeit untersuchten Kristalle danke ich außerdem Dr. Saicharan Aswartham, Dr. Sabine Wurmehl, Christian Blum, Prof. Claudia Felser, Dr. Kautstuv Manna und Prof. Paul Canfield, insbesondere jedoch Dr. Rhea Kappenberger für ihre in vielerlei Hinsicht facettenreichen LaFeAsO-Einkristalle.

Dr. Danny Baumann und Tino Schreiner, außerdem Falk Sander und seiner Werkstatt-Crew sowie den Elektrotechnikern um Peter Werner möchte ich für die tatkräftige organisatorische und technische Unterstützung im Labor danken.

Natürlich danke ich auch der Doktoranden- und Postdoktorandenschaft des IFW für geteiltes Wissen, viel Witz und ausgedehnte Grill-Abende an der Elbe, Promotions- und Weihnachtsfeiern, insbesondere den Altvorderen Dr. Frank Steckel, Dr. Nadine Heming, Dr. Rhea Kappen-

berger, Dr. Stephan Zimmermann und Dr. Uwe Gräfe, meinem früheren Doktorandensprecher-Kollegen Sebastian Selter, außerdem Jose Guevara Parra, Dr. Julian Zeisner, Dr. Margarita Iakovleva, Patrizia Fritsch, Francesco Scaravaggi, Piotr Lepucki, Dr. Adam Dioguardi, Dr. Erik Haubold, Dr. Victoria Eckert, Emmanouil Koutsouflakis, Sebastian Schimmel, Sven Hoffmann, Christoph Wellm, Dr. Hajo Grafe, Grigory Shipunov, Ziba Zangenehpourzadeh und Dr. Christian Salazar Enriquez.

Zusätzlich möchte ich auch Kerstin Höllerer, Katja Schmiedel und Rita Taubert aus dem IFF-Sekretariat sowie den SFB-Koordinatoren Tatjana Schoffer und Kerstin Brankatschk für die ambitionierte Organisation und die ausdauernde Beantwortung jeglicher Fragen danken. Außerdem danke ich André Eichler und René Pokorny für die stets gut gelaunte und kompetente IT-Unterstützung und den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern der Mensa für die täglichen kulinarischen Abenteuer.

Mein ganz besonderer Dank gilt außerdem Christopher Georgi, Lydia Kirsche und Dr. Adam Dioguardi für das schnelle und unermüdliche Korrekturlesen.

Darüber hinaus danke ich allen Freunden und Verwandten, die indirekt durch diversen nicht-wissenschaftlichen Ausgleich an dieser Arbeit mitgewirkt haben.

Außerdem danke ich meinen Eltern Bettina und Jürgen Wuttke von ganzem Herzen dafür, dass sie zu jeder Zeit alles Erdenkliche getan haben, um mich und meine Ausbildung zu unterstützen.

Nicht zuletzt gilt mein unendlicher Dank Lydia Kirsche für ihren Rückhalt sowie ihre immerwährende Ermutigung und Liebe.

# Erklärung

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt wurde. Die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Diese Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Diese Arbeit wurde unter Betreuung von Prof. Büchner am Institut für Festkörperforschung (IFF) des Institutes für Festkörper- und Werkstoffforschung Dresden e.V. (IFW Dresden) angefertigt. Es haben keine früheren erfolglosen Promotionsverfahren stattgefunden.

Ich erkenne hiermit die Promotionsordnung der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften der Technischen Universität Dresden vom 23.02.2011 an.

Christoph Wuttke

Dresden, August 2020